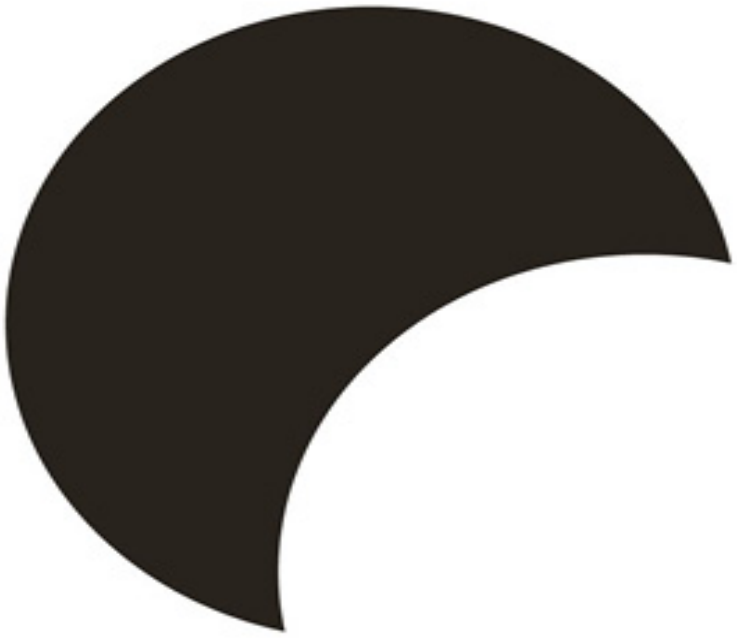
MECHANIKA KWANTOWA

TEORETYCZNE MINIMUM



Co musisz wiedzieć,
żeby zacząć zajmować się fizyką

LEONARD SUSSKIND

ART FRIEDEMAN

Prószyński i S-ka

MECHANIKA KWANTOWA

TEORETYCZNE MINIMUM

Co musisz wiedzieć,
żeby zacząć zajmować się fizyką

LEONARD SUSSKIND

ART FRIEDEMAN

Przełożyli Joanna i Adam Skalscy

Prószyński i S-ka

Tytuł oryginału
QUANTUM MECHANICS
The Theoretical Minimum

Copyright © 2014 by Leonard Susskind and Art Friedman
All rights reserved

Projekt okładki
Zbigniew Larwa

Redaktor prowadzący
Adrian Markowski

Redakcja
Anna Kaniewska

Korekta
Bronisława Dziedzic-Wesołowska

ISBN 978-83-8097-429-6

Warszawa 2016

Wydawca
Prószyński Media Sp. z o.o.
02-697 Warszawa, ul. Rzymowskiego 28
www.proszynski.pl

Dla naszych rodziców,
dzięki którym wszystko to stało się możliwe:
Irene i Benjamina Susskindów
oraz
George'a i Trudy Friedmanów

PRZEDMOWA

Albert Einstein, którego z wielu powodów można nazwać ojcem mechaniki kwantowej, miał do niej specyficzny stosunek, będący mieszanką miłości i nienawiści. Jego dyskusje z Nielsem Bohrem, w których Bohr prezentował całkowitą akceptację mechaniki kwantowej, a Einstein pozostawał względem niej głęboko sceptyczny, należą do najsłynniejszych dysput w historii nauki. Większość fizyków uznała, że w tym sporze zwyciężył Bohr, a Einstein przegrał. Moim zdaniem podzielanym, jak sądzę, przez coraz większą grupę uczonych, takie podsumowanie nie oddaje sprawiedliwości poglądom Einsteina.

Obydwaj dyskutanci odznaczali się dużą wnikliwością. Einstein próbował z całych sił wykazać, że mechanika kwantowa jest niespójna, a Bohr po kolei odpierał wszystkie jego argumenty. W końcu jednak Einstein wskazał problem tak głęboki, tak dalece sprzeczny z intuicją, budzący tak wiele zastrzeżeń, a jednocześnie tak fascynujący, że na początku XXI wieku na nowo zaczął zajmować fizyków teoretycznych. Jedyną odpowiedzią Bohra na ostatnie wielkie odkrycie Einsteina – *splątanie* – było milczenie.

Zjawisko splątania to fundamentalny aspekt mechaniki kwantowej, sprawiający, że tak bardzo różni się ona od fizyki klasycznej. Stawia ono pod znakiem zapytania całe nasze rozumienie tego, co w fizycznym świecie jest *rzeczywiste*. Zwyczajna intuicja dotycząca układów fizycznych mówi nam, że jeśli o jakimś układzie wiemy wszystko – to znaczy wszystko, czego w teorii można się o nim dowiedzieć – to wiemy też wszystko o jego częściach. Jeśli posiadamy pełną informację o stanie samochodu, to wiemy również wszystko o jego kołach, silniku, skrzyni biegów, a nawet o śrubach mocujących tapicerkę. Jeśli mechanik stwierdziłby: „Wiem wszystko

o pana samochodzie, ale niestety nie umiem nic powiedzieć o żadnej z jego części", uznalibyśmy jego słowa za pozbawione sensu.

A jednak właśnie na coś takiego Einstein zwrócił uwagę Bohrowi: w mechanice kwantowej można wiedzieć wszystko o pewnym układzie i jednocześnie nie mieć żadnej wiedzy o jego pojedynczych częściach. Bohr nie docenił wagi tego stwierdzenia. Mógłbym dodać, że zignorowało je również kilka pokoleń autorów podręczników do fizyki kwantowej.

Każdy wie, że mechanika kwantowa ma w sobie coś dziwnego, ale myślę, że bardzo nieliczni ludzie potrafiliby wyjaśnić, na czym właściwie ta dziwność polega. Ta książka to niestroniący od szczegółów technicznych cykl wykładów o mechanice kwantowej, ale różni się ona istotnie od większości innych wykładów czy podręczników. Skoncentrujemy się w niej na logicznych zasadach teorii kwantowej, a naszym celem nie będzie ukrycie niezwykłej dziwaczności kwantowej logiki, ale raczej czytelne jej przedstawienie.

Chciałbym ci przypomnieć, że ta książka to jeden z tomów serii blisko związanej z moim internetowym cyklem wykładów „Teoretyczne minimum". Jej współautor, Art Friedman, był słuchaczem tych wykładów. Nasza książka niewątpliwie zyskała na tym, że Art sam uczył się omawianej w niej teorii i w związku z tym bardzo uważnie wyłapywał kwestie, które mogłyby się okazać niejasne dla początkującego czytelnika. Pisanie jej sprawiło nam wiele uciechy. Staraliśmy się podzielić tą przyjemnością z czytelnikami, umieszczając w tekście sporo żartów. Jeśli cię nie rozśmieszą, po prostu je zignoruj.

Leonard Susskind

Kiedy kończyłem magisterskie studia informatyczne na Uniwersytecie Stanforda, nawet przez chwilę nie myślałem, że jakiś czas później wrócę tam, by słuchać wygłaszanych przez Leonarda wykładów z fizyki. Moja krótka „kariera" fizyka skończyła się wiele lat wcześniej na zdobyciu licencjatu. Zainteresowanie przedmiotem jednak nigdy nie zanikło.

Wygląda na to, że nie jestem w tym osamotniony – na świecie jest pełno ludzi, których naprawdę fascynuje fizyka, ale okoliczności nie pozwoliły im zajmować się nią zawodowo. Ta książka powstała właśnie z myślą o takich jak my.

Mechanikę kwantową można – do pewnego stopnia – docenić na czysto jakościowym, koncepcyjnym poziomie, ale to matematyka sprawia, że jej piękno staje się w pełni widoczne. Staraliśmy się, by przedstawić tę wspaniałą, bogatą teorię w sposób przystępny dla ludzi niezajmujących się zawodowo fizyką, ale mających pewne przygotowanie matematyczne. Myślę, że udało się nam to całkiem nieźle. Mam nadzieję, że się zgodzicie z tym zdaniem.

Nikomu nie udało się zakończyć pracy nad podobnym projektem bez pomocy innych. Pomoc ekipy z Brockman.Inc. zapewniła, że wszystkie sprawy dotyczące umów (i innych negocjacji biznesowych) zostały załatwione sprawnie i bez kłopotów, a zespół redakcyjny w Perseus Books okazał się najwyższej klasy. Serdecznie dziękuję TJ Kelleherowi, Rachel King i Tisse Takagi. Szczęśliwie przyszło nam też pracować z utalentowanym redaktorem, Johnem Searcym.

Jestem bardzo wdzięczny innym słuchaczom wykładów Leonarda za przemyślane i odważne pytania, które niestrudzenie stawiali, oraz za wiele inspirujących rozmów po zajęciach. Rob Colwell, Todd Craig, Monty Frost i John Nash podzielili się ze mną uwagami po przeczytaniu pierwszej wersji książki. Jeremy Branscome i Russ Bryan przejrzeli ją całą bardzo dokładnie i znaleźli miejsca, które wymagały poprawek.

Dziękuję rodzinie i przyjaciołom za wsparcie i entuzjastyczne nastawienie. Szczególnie dziękuję mojej córce Hannah za wzięcie na siebie różnych obowiązków.

Oprócz miłości, słów zachęty, przenikliwych rad i poczucia humoru wkład mojej wspaniałej żony, Margaret Sloan, do tej książki objął też stworzenie mniej więcej jednej trzeciej wykresów i obydwu ilustracji „U Hilberta”. Dzięki, Maggie.

Na początku pracy nad naszym projektem Leonard, wyczuwając moją prawdziwą motywację, powiedział, że jednym z najlepszych sposobów na uczenie się fizyki jest pisanie o niej. To oczywiście słuszne stwierdzenie, ale nie miałem pojęcia, do jakiego stopnia.

Bardzo się cieszę, że mogłem się o tym przekonać. Wielkie dzięki, Leonard.

Art Friedman

PROLOG

Art podnosi głowę znad kufla z piwem i mówi:
– Lenny, zagrajmy rundkę Einsteina–Bohra.
– Dobra, ale mam już dość przegrywania. Tym razem ty będziesz Artsteinem, a ja L-Bohrem. Zaczynasz.
– W porządku. Na początek zaatakuję tak: Bóg nie gra w kości. Ha ha, panie L-Bohr, punkt dla mnie.
– Nie tak szybko, panie Artstein, nie tak szybko. To pan, przyjacielu, pierwszy zwrócił uwagę na probabilistyczną naturę teorii kwantowej. I co, to chyba zasługuje na dwa punkty!
– Cóż. Cofam swoją wypowiedź.
– Nie może pan jej cofnąć.
– Ależ mogę!

Niewielu ludzi zdaje sobie sprawę, że Einstein w napisanym w 1917 roku artykule *O kwantowej teorii promieniowania* twierdził, iż emisja promieniowania gamma podlega prawom statystycznym.

PROFESOR I SKRZYPEK WCHODZĄ DO BARU

Pierwszy tom zawierał przerywniki opisujące krótkie rozmowy między Lennym i George'em, dwiema fikcyjnymi postaciami kojarzącymi się z bohaterami powieści Johna Steinbecka. Analogiczne fragmenty tej książki są inspirowane opowiadaniami Damona Runyona opisującymi świat zaludniony przez oszustów, kombinatorów, degeneratów, cwaniaczków, którzy potrafią wyjść obronną ręką z każdej sytuacji, oraz naiwniaków na siłę próbujących zbawić świat. Oprócz nich

pojawia się oczywiście kilku zwykłych ludzi próbujących jakoś przeżyć z dnia na dzień. Akcja rozwija się przede wszystkim w popularnym barze, zwanym „U Hilberta”. Pewnego dnia wchodzą do niego Lenny i Art, dwóch żółtodziobów z Kalifornii, którzy odłączyli się od swojej wycieczki. Życz im szczęścia. Będzie potrzebne.

CO ZE SOBĄ ZABRAĆ?

Aby wybrać się w tę podróż, nie musicie być fizykami, ale powinniście znać podstawy rachunku różniczkowego i algebry liniowej. Dobrze by też było, gdybyście wiedzieli coś o materiale wyłożonym w pierwszym tomie. Nie przejmujcie się, jeśli dawno nie mieliście do czynienia z matematyką. W trakcie wykładu będziemy poświęcać sporo czasu na przypominanie i wyjaśnianie potrzebnego materiału, zwłaszcza z zakresu algebry liniowej. Pierwszy tom zawierał przegląd podstaw rachunku różniczkowego.

Może wam się wydawać, że nasz żartobliwy ton oznacza, iż nie zależy nam na precyzji. To nie tak. Naszym celem jest sprawienie, aby trudny temat stał się „tak prosty, jak tylko to możliwe, ale nie prostszy”. Mamy nadzieję, że przy okazji nie będziemy się nudzić. Do zobaczenia „U Hilberta”.

WSTĘP

Mechanika klasyczna zgadza się z naszą intuicją: obiekty poruszają się tak, jak się tego spodziewamy. Doświadczony gracz futbolu amerykańskiego może zerknąć na lecącą piłkę i na podstawie jej położenia i prędkości stwierdzić, dokąd powinien pobiec, by ją w odpowiednim momencie złapać. Oczywiście nagły nieoczekiwany podmuch wiatru może pokrzyżować mu plany, ale stałoby się tak tylko dlatego, że nie wziął pod uwagę wszystkich istotnych zmiennych. Przyczyna, dla której mechanika klasyczna zgadza się z naszą intuicją, jest oczywista: ludzie, a przed nimi zwierzęta, wykorzystywali ją wielokrotnie każdego dnia, by przeżyć. Natomiast nikt przed XX wiekiem nie używał mechaniki kwantowej. Opisuje ona obiekty tak malutkie, że pozostające całkowicie poza zasięgiem ludzkich zmysłów. Wydaje się więc rozsądne, że ewolucja nie wyposażyła nas w intuicję praktyczną w świecie kwantowym. Jedyny sposób, na jaki możemy go zrozumieć, to dostarczenie naszym umysłom narzędzi w postaci matematyki abstrakcyjnej. Na szczęście, z pewnych dziwacznych powodów, ewolucja sprawiła, że potrafimy się nimi posługiwać.

Zwykle na początku, zanim nawet usłyszymy o mechanice kwantowej, uczymy się mechaniki klasycznej. Fizyka kwantowa jest jednak dużo bardziej fundamentalna niż fizyka klasyczna. Zgodnie z naszym stanem wiedzy mechanika kwantowa podaje dokładny opis każdego układu fizycznego. Niektóre układy są na tyle duże, że mechanikę kwantową można rozsądnie przybliżać mechaniką klasyczną. Tak naprawdę mechanika klasyczna jest właśnie tym: przybliżeniem. Z logicznego punktu widzenia należałoby najpierw uczyć się mechaniki kwantowej, ale większość nauczycieli fizyki odradza takie podejście. Nawet ten cykl wykładów – seria

„Teoretyczne minimum” – zaczął się od mechaniki klasycznej. Mimo to w naszych kwantowych wykładach mechanika klasyczna nie będzie odgrywała praktycznie żadnej roli, nie licząc samego końca, kiedy to podstawowe zasady mechaniki kwantowej będą już dobrze wyjaśnione. Myślę, że to naprawdę właściwe podejście, nie tylko z logicznego, lecz także z pedagogicznego punktu widzenia. W ten sposób nie grozi nam wpadnięcie w pułapkę myślenia, że mechanika kwantowa to w zasadzie tylko mechanika klasyczna plus kilka nowych sztuczek. Przy okazji warto zauważyć, że mechanika kwantowa jest technicznie znacznie prostsza niż mechanika klasyczna.

Najprostszy układ klasyczny – elementarna jednostka logiczna w informatyce – to układ o dwóch stanach. Czasami nazywa się go bitem. Może on przedstawiać dowolny obiekt mający dwa możliwe stany: monetę, która będzie pokazywać orła bądź reszkę, włączony albo wyłączony przełącznik, albo maleńki magnesik, który może być skierowany tylko na północ bądź na południe. Jak się pewnie domyślasz, zwłaszcza jeśli przestudiowałeś pierwszy wykład pierwszego tomu, teoria klasycznych układów o dwóch stanach jest wyjątkowo prosta – można nawet powiedzieć nudna. W tej książce zaczniemy rozważania od kwantowego odpowiednika układu o dwóch stanach, zwanego kubitem, który jest dużo bardziej interesujący. Aby go zrozumieć, będziemy potrzebować całkowicie nowego sposobu myślenia – nowych podstaw logiki.

WYKŁAD 1

Układy i doświadczenia

Lenny i Art wchodzą do „Hilberta”.
– Co to jest, Strefa Mroku? Czy jakieś wesołe miasteczko? Nie mogę się zorientować, co i jak – mówi Art.
– Weź głęboki oddech. Przyzwyczaisz się – przekonuje Lenny.
– W którą stronę jest góra? – pyta Art.

1.1 MECHANIKA KWANTOWA JEST INNA

Co jest tak szczególnego w mechanice kwantowej? Dlaczego tak trudno ją zrozumieć? Nasuwa się odpowiedź zrzucająca winę na „skomplikowaną matematykę”, i być może ma ona nawet w sobie trochę prawdy. Nie może być jednak pełna. Wiele osób niezajmujących się zawodowo fizyką potrafi opanować mechanikę klasyczną i teorię pola, które też wymagają stosowania zaawansowanej matematyki.

Mechanika kwantowa zajmuje się zachowaniem obiektów tak miniaturowych, że ludzie są całkowicie nieprzygotowani do ich wizualizacji. Pojedyncze atomy sięgają górnego końca tej skali, jeśli chodzi o rozmiar. Zwykle rozważa się elektrony. *Nasze organy zmysłowe są po prostu nieprzystosowane do odczuwania ruchu elektronu. W najlepszym wypadku pozostaje nam zrozumienie elektronów i ich ruchu jako abstrakcyjnych pojęć matematycznych.*

– I co z tego? – mógłby zapytać sceptyk. – Mechanika klasyczna jest wypełniona abstrakcyjnymi pojęciami matematycznymi po brzegi. Wystarczy wspomnieć punktowe masy, ciała sztywne, inercyjne układy odniesienia, położenia, pędy, pola czy fale, a lista jest dużo, dużo dłuższa. W stosowaniu abstrakcyjnej matematyki nie ma nic nowego.

To uczciwe postawienie sprawy. Rzeczywiście światy klasyczny i kwantowy mają pewne istotne wspólne aspekty. Mechanika kwantowa jest jednak inna na dwa zasadnicze sposoby:

1. *Inne pojęcia abstrakcyjne.* Abstrakcyjne pojęcia używane w mechanice kwantowej różnią się diametralnie od tych pojawiających się w mechanice klasycznej. Przekonamy się na przykład, że idea stanu w mechanice kwantowej różni się od swojego klasycznego odpowiednika już na poziomie koncepcyjnym. Stany są przedstawiane za pomocą innych obiektów matematycznych i mają odmienną strukturę logiczną.
2. *Stany i pomiary*. W klasycznym świecie związek między stanem układu a wynikiem pomiaru ma bardzo prosty, wręcz trywialny charakter. Określenia, które opisują stan (na przykład położenie i pęd cząstki), odpowiadają dokładnie terminom charakteryzującym pomiary tego stanu. Inaczej mówiąc, stan układu można określić, wykonując na nim jakiś eksperyment. W świecie kwantowym przestaje to być prawdą. Stany i pomiary są dwiema odrębnymi koncepcjami, a związek między nimi okazuje się skomplikowany i mało intuicyjny.

Te stwierdzenia odgrywają fundamentalną rolę i nieraz jeszcze do nich wrócimy.

1.2 SPINY I KUBITY

Koncepcja spinu wywodzi się z fizyki cząstek. Cząstki mają oprócz położenia w przestrzeni pewne dodatkowe własności, na przykład mogą mieć ładunek elektryczny czy masę – elektron nie jest tym samym co kwark czy neutrino. Jednak nawet konkretny rodzaj cząstki, takiej jak elektron, nie jest do końca określony przez swoje położenie. Wiąże się z nim dodatkowy stopień swobody, zwany *spinem*. Spin można sobie naiwnie wyobrażać jako małą strzałkę wskazującą pewien kierunek, ale obraz ten jest zbyt klasyczny, by mógł precyzyjnie odpowiadać rzeczywistej sytuacji. Spin elektronu to tak bardzo kwantowy układ, jak tylko się da, i próby przedstawienia go za pomocą klasycznego obrazu są skazane na niepowodzenie.

Koncepcję spinu można potraktować dużo bardziej abstrakcyjnie, rozważając ją w oderwaniu od elektronu, i właśnie tak zrobimy. Kwantowy spin to układ, który warto badać sam w sobie. Tak naprawdę kwantowy spin odizolowany od niosącego go przez przestrzeń elektronu to z jednej strony najprostszy, z drugiej zaś najbardziej kwantowy z układów.

Odizolowany spin kwantowy to przykład należący do szerokiej klasy prostych układów nazywanych kubitami – kwantowymi bitami[1] – odgrywających w kwantowym świecie tę samą rolę, jaką w określaniu stanu twojego komputera mają bity logiczne. Wiele układów – może nawet wszystkie – można zbudować, łącząc ze sobą pojedyncze kubity. W związku z tym poznając je, dowiadujemy się wiele więcej, niż mogłoby się wydawać na pierwszy rzut oka.

1.3 EKSPERYMENT

Skonkretyzujmy teraz te rozważania, wykorzystując do tego najprostszy przykład, jaki umiemy znaleźć. Pierwszy wykład pierwszego tomu zaczęliśmy od rozważania bardzo prostego, deterministycznego układu: monety, która może pokazywać albo orła (O), albo reszkę (R). Możemy ją nazwać układem o dwóch stanach, O i R. Podchodząc do sprawy bardziej formalnie, wprowadzamy

„stopień swobody” oznaczany σ, który może przyjmować jedną z dwóch wartości: +1 albo –1. Stan O zastępujemy wzorem

$$\sigma = +1,$$

a stan R:

$$\sigma = -1.$$

Z klasycznego punktu widzenia to już wszystko, co można powiedzieć o przestrzeni stanów. Układ jest albo w stanie $\sigma = +1$, albo w stanie $\sigma = -1$, i żadna pośrednia możliwość nie wchodzi w grę. W mechanice kwantowej będziemy myśleć o takim układzie jako o kubicie.

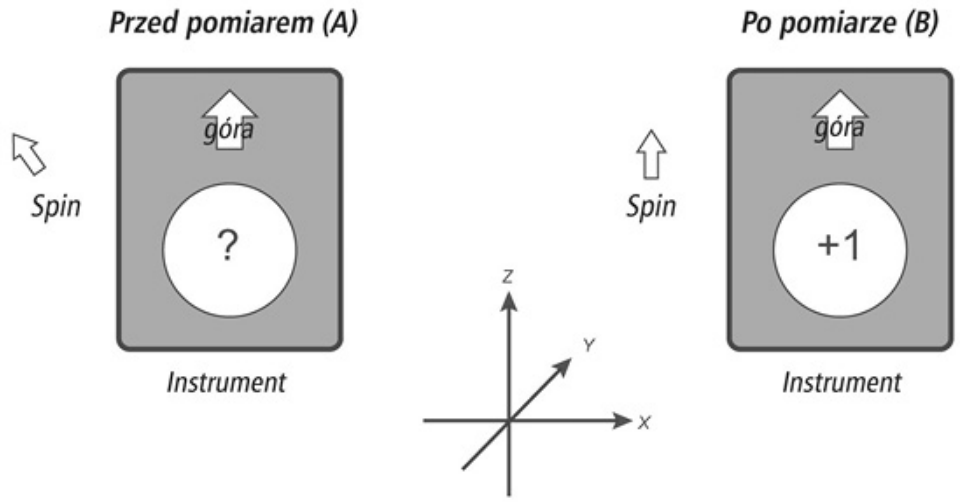
W pierwszym tomie omówiliśmy też proste prawa ewolucji wskazujące, jak uaktualniać w kolejnych chwilach stan układu. Najprostsze możliwe prawo to takie, przy którym nic się nie dzieje. Opisuje ono przejście od traktowanej w sposób dyskretny chwili (n) do kolejnej chwili ($n + 1$) wzorem

$$\sigma(n + 1) = \sigma(n).$$

(1.1)

Ujawnijmy teraz ukryte założenie, które zlekceważyliśmy w pierwszym tomie. W eksperymencie zawsze bierze udział coś więcej niż tylko badany układ. Musimy też uwzględnić instrument A wykonujący pomiary i rejestrujący ich wyniki. W układzie o dwóch stanach instrument pomiarowy oddziałuje z układem (czyli ze spinem) i rejestruje wartość σ. Będziemy myśleć o instrumencie pomiarowym jako o czarnej skrzynce[2] z okienkiem pokazującym wynik pomiaru. Na skrzynce umieszczona jest też strzałka wskazująca „tą stroną do góry”. Strzałka odgrywa istotną rolę, gdyż mówi nam, jak instrument został zorientowany w przestrzeni, a jej

kierunek wpłynie na wyniki naszych pomiarów. Zaczynamy od ustawienia jej w kierunku osi *z* (zob. ilustracja 1.1). Początkowo nie wiemy, czy $\sigma = +1$ czy $\sigma = -1$. Naszym zadaniem jest przeprowadzenie eksperymentu, który pozwoli nam znaleźć wartość σ.

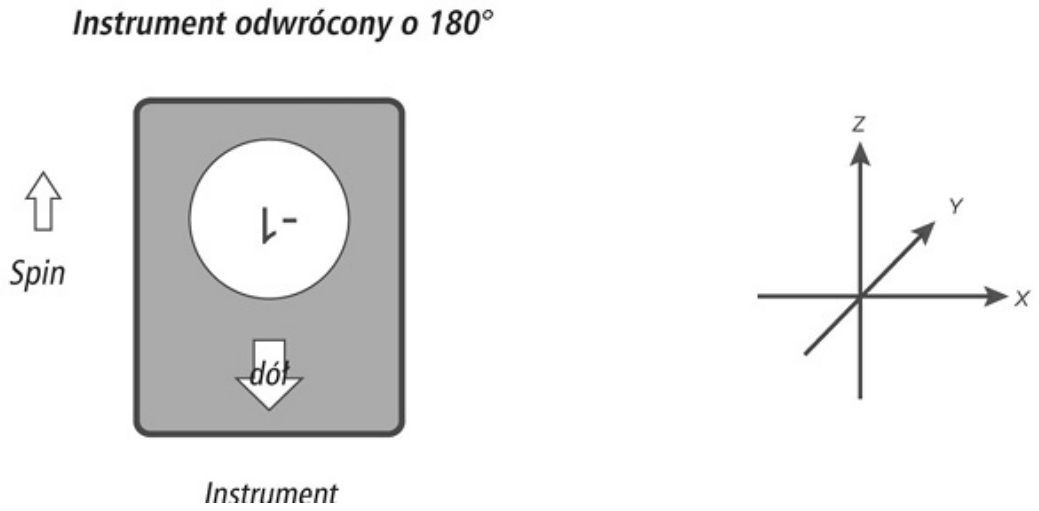


Ilustracja 1.1. (A) Spin i niezawierający kota instrument pomiarowy przed dokonaniem pomiaru. (B) Spin i instrument po dokonaniu pojedynczego pomiaru, pokazującego σz = +1. Spin jest teraz przygotowany w stanie σz = +1. Jeśli nie będziemy go w żaden sposób zaburzać, a instrument pozostanie skierowany w ten sam sposób, wszystkie kolejne pomiary dadzą ten sam wynik. Osie współrzędnych przedstawiają naszą konwencję oznaczania kierunków w przestrzeni.

Zanim instrument zacznie oddziaływać ze spinem, okienko jest puste (na naszych diagramach oznaczamy to znakiem zapytania). Po pomiarze σ okienko pokazuje +1 lub –1. Spoglądając na instrument pomiarowy, możemy wyznaczyć wartość σ. Cały proces to bardzo prosty eksperyment zaprojektowany w celu zmierzenia σ.

Teraz, kiedy już zmierzyliśmy σ, ustawmy na nowo instrument w stanie początkowym i nie zaburzając w żaden sposób spinu, wykonajmy pomiar σ kolejny raz. Przy założeniu, że obowiązuje proste prawo z równania 1.1, powinniśmy otrzymać tę samą odpowiedź co za pierwszym razem. Po wyniku $\sigma = +1$ pojawi się

wynik $\sigma = +1$. Podobnie byłoby dla $\sigma = -1$. Tak samo będzie po dowolnej liczbie powtórzeń. To bardzo dobrze, gdyż dzięki temu możemy potwierdzić wynik eksperymentu. Możemy też ująć ten fakt następująco: pierwsze oddziaływanie z instrumentem A *przygotowuje* układ w jednym z dwóch możliwych stanów. Kolejne eksperymenty *potwierdzają*, że układ znajduje się w tym stanie. Na razie nie ma różnicy między fizyką klasyczną i kwantową.

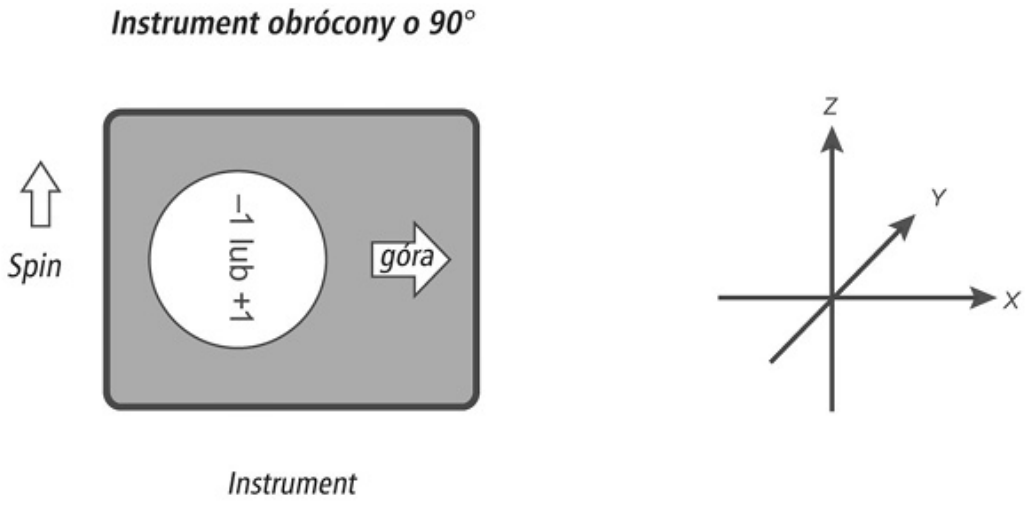


Ilustracja 1.2. Instrument został odwrócony, a spinu w żaden sposób nie zaburzono. Nowy pomiar pokazuje $\sigma_Z = -1$.

Zróbmy teraz coś nowego. Po przygotowaniu spinu przez wykonanie na nim pomiaru instrumentem A odwróćmy instrument do góry nogami i zmierzmy σ jeszcze raz (pokazuje to ilustracja 1.2). Okaże się wtedy, że jeśli początkowo przygotowaliśmy $\sigma = +1$, to odwrócony instrument zarejestruje $\sigma = -1$. Podobnie jeśli początkowo przygotowaliśmy $\sigma = -1$, to odwrócony instrument zarejestruje $\sigma = +1$. Innymi słowy, odwrócenie instrumentu pomiarowego powoduje wymianę $\sigma = +1$ i $\sigma = -1$. Na podstawie tych wyników możemy stwierdzić, że σ to stopień swobody powiązany z kierunkiem w przestrzeni. Jeśli na przykład σ byłaby jakimś wektorem, to należałoby się spodziewać, że odwrócenie instrumentu spowoduje zmianę znaku odczytywanej wartości. Proste wyjaśnienie mówiłoby, że instrument mierzy składową tego wektora

odpowiadającą umocowanej wewnątrz instrumentu osi. Czy takie wyjaśnienie może pozostać poprawne dla wszystkich ustawień?

Jeśli uważalibyśmy, że spin jest wektorem, to w naturalny sposób opisywalibyśmy go przy użyciu trzech składowych: σ_z, σ_x i σ_y. Ustawienie instrumentu pionowo wzdłuż osi *z* odpowiada pomiarowi σ_z.



Ilustracja 1.3. Instrument obrócony o 90°. Nowy pomiar pokazuje $\sigma_X = -1$ z prawdopodobieństwem 50 procent.

Wciąż nie widać różnicy między fizyką klasyczną a kwantową. Pojawia się ona dopiero wtedy, gdy obrócimy instrument o jakiś kąt, powiedzmy o π/2 radianów (czyli 90°). Początkowo instrument stoi pionowo (strzałka wskazuje kierunek do góry wzdłuż osi *z*). Przygotowujemy w ten sposób spin $\sigma = +1$. Następnie obracamy A, tak by strzałka ułożyła się wzdłuż osi *x*, i wykonujemy pomiar wartości, którą należałoby zapewne uznać za *x*-ową składową spinu, σ_x.

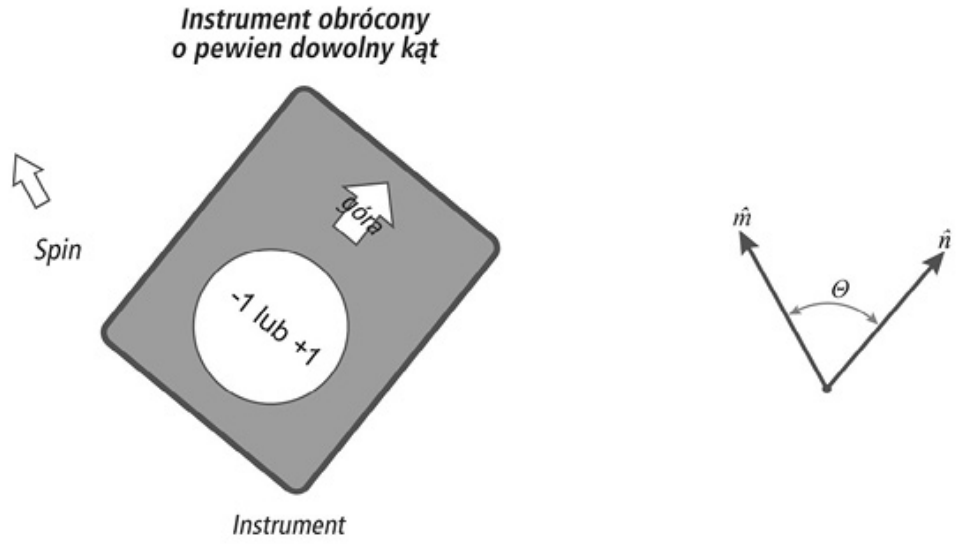
Jeśli σ naprawdę przedstawia składową jakiegoś wektora ułożoną w kierunku strzałki, spodziewalibyśmy się, że w wyniku pomiaru otrzymamy 0. Dlaczego? Początkowo stwierdziliśmy, że σ leży wzdłuż osi *z*, co sugeruje, że jej składowa wzdłuż osi *x* musi być równa zeru. Kiedy jednak mierzymy σ_x, czeka nas niespodzianka: zamiast wyniku

σ_x = 0 instrument pokazuje albo σ_x = +1, albo σ_x = −1. A okazuje się bardzo uparty – niezależnie od tego, jak go ustawimy, odmawia udzielenia odpowiedzi innej niż σ = ±1. Jeśli σ faktycznie jest wektorem, to musi być to wyjątkowo dziwaczny wektor.

Tak czy inaczej, odkryliśmy coś interesującego. Przypuśćmy, że powtórzymy tę operację wielokrotnie, za każdym razem zachowując się zgodnie z taką samą procedurą, czyli:

- zaczynając od A ustawionego wzdłuż osi *z* i przygotowując σ = +1,
- obracając następnie instrument tak, by był skierowany wzdłuż osi *x*,
- mierząc σ.

Powtarzany eksperyment produkuje losową listę plus i minus jedynek. Determinizm zniknął, ale pozostawił po sobie coś szczególnego. Jeśli wykonamy wiele powtórzeń, przekonamy się, że liczby wyników σ = +1 i σ = −1 są statystycznie równe. Inaczej mówiąc, średnia wartość σ to 0. Wnioskujemy więc, że zamiast klasycznego wyniku – czyli stwierdzenia, że *x*-owa składowa σ jest równa 0 – to *średnia otrzymana w powtarzanych eksperymentach* jest równa 0.



Ilustracja 1.4. Instrument obrócony o pewien dowolny kąt w płaszczyźnie x–z. Średni wynik pomiaru to $\hat{n} \cdot \hat{m}$.

Zróbmy teraz to wszystko jeszcze raz, ale zamiast obracać A, tak by ułożył się wzdłuż osi *x*, obróćmy go tak, by był skierowany wzdłuż dowolnego wektora jednostkowego[3] $\hat{n}$. W mechanice klasycznej, jeśli σ to wektor, oczekiwalibyśmy, że wynik eksperymentu powie nam, jaka jest składowa σ wzdłuż osi $\hat{n}$. Jeśli $\hat{n}$ leży pod kątem Θ do osi *z*, to klasyczna odpowiedź miałaby postać $\sigma = \cos\Theta$. Jak jednak pewnie się domyślasz, za każdym razem, kiedy wykonujemy eksperyment, otrzymujemy $\sigma = +1$ lub $\sigma = -1$. Statystyczny rozkład uzyskiwanych wyników prowadzi do średniej wartości $\cos\Theta$.

Sytuacja może być oczywiście dużo ogólniejsza. Nie musieliśmy zaczynać od A ustawionego wzdłuż osi *z*. Wybierzmy dowolny kierunek $\hat{m}$ i zacznijmy od strzałki ułożonej zgodnie z $\hat{m}$. Przygotujmy spin tak, by instrument pokazywał $\sigma = +1$. Potem, bez zaburzania spinu, obróćmy instrument, tak by strzałka wskazywała kierunek $\hat{n}$, jak pokazano to na ilustracji 1.4. Nowy eksperyment wykonany na tym samym spinie da losowy wynik ±1, ale średnia wartość wielu zaaranżowanych w ten sposób pomiarów okaże się równa cosinusowi kąta między wektorami $\hat{n}$ i $\hat{m}$. Inaczej mówiąc, średnia wartość będzie równa $\hat{n} \cdot \hat{m}$.

Kwantowomechaniczna notacja na statystyczną średnią wielkości Q to wprowadzona przez Diraca notacja nawiasowa: <Q>. Wyniki naszych rozważań o eksperymentach można podsumować następująco: jeśli zaczniemy od A ustawionego wzdłuż $\hat{m}$, potwierdzimy, że $\sigma = +1$, a następnie wykonamy pomiar instrumentem A ułożonym zgodnie z $\hat{n}$, to statystycznie otrzymamy

$$\langle \sigma \rangle = \hat{n} \cdot \hat{m}$$

W ten sposób się dowiedzieliśmy, że układy kwantowomechaniczne nie są deterministyczne – wyniki eksperymentów mają losowy charakter – ale jeśli powtórzymy doświadczenie wielokrotnie, to

średnie uzyskanych wartości mogą zachowywać się, przynajmniej do pewnego stopnia, jak wielkości znane z fizyki klasycznej.

1.4 EKSPERYMENTY NIGDY NIE SĄ DELIKATNE

W każdym eksperymencie bierze udział układ zewnętrzny – instrument pomiarowy – który musi oddziałać z badanym układem, by można było zarejestrować wynik. W tym sensie każdy eksperyment ma charakter inwazyjny. To prawda zarówno w fizyce klasycznej, jak i w kwantowej, ale tylko w odniesieniu do tej drugiej ma zasadnicze znaczenie. Z czego to wynika? W fizyce klasycznej wpływ idealnego instrumentu pomiarowego na mierzony układ jest pomijalnie mały. Doświadczenia mogą być dowolnie delikatne i nadal dawać dokładne i możliwe do powtórzenia wyniki, na przykład kierunek strzałki można ustalić, odbijając od niej promień światła i skupiając go w jakimś punkcie, by otrzymać obraz. Chociaż to prawda, że światło, by utworzyć obraz, musi mieć odpowiednio małą długość fali, to nic w klasycznej fizyce nie przeszkadza temu, by został on uzyskany przy dowolnie słabym promieniu. Inaczej mówiąc, światło może nieść dowolnie małą energię.

W mechanice kwantowej sytuacja wygląda zupełnie inaczej. Każde oddziaływanie, które jest wystarczająco silne, by pozwoliło zmierzyć jakąś cechę układu, musi być jednocześnie na tyle silne, by zaburzyć jakąś inną cechę tego samego układu. Wynika z tego, że nie sposób dowiedzieć się czegoś o układzie kwantowym, przy okazji czegoś w nim nie zmieniając.

Powinno to być jasno widoczne w przykładach dotyczących A i σ. Przypuśćmy, że zaczynamy od $\sigma = +1$ zmierzonego wzdłuż osi z. Jeśli kolejny raz zmierzymy σ za pomocą A ułożonego wzdłuż osi z, wynik ten zostanie potwierdzony. Możemy to powtarzać wielokrotnie i za każdym razem otrzymamy ten sam rezultat. Rozważmy jednak inną możliwość: między kolejnymi pomiarami wzdłuż osi z obróćmy A o 90°, wykonajmy pomiar w tym położeniu i obróćmy instrument z powrotem. Czy wykonany teraz pomiar wzdłuż osi z potwierdzi

początkowy wynik? Odpowiedź okazuje się negatywna. Pośredni pomiar wzdłuż osi *x* powoduje, że spin znajdzie się w całkowicie losowej konfiguracji, jeśli chodzi o wynik kolejnego pomiaru. Nie potrafimy w żaden sposób wyznaczyć spinu w innym kierunku, nie wpływając tym samym na ostateczny pomiar. Można powiedzieć, że pomiar jednej składowej spinu niszczy informacje o innej składowej. Tak naprawdę po prostu nie da się poznać jednocześnie składowych spinów odpowiadających różnym osiom, a przynajmniej nie tak, by dało się odpowiednie wyniki odtworzyć w kolejnych eksperymentach. Stany układów kwantowych fundamentalnie różnią się od stanów układów klasycznych.

1.5 ZDANIA LOGICZNE

Przestrzeń stanów klasycznego układu to zbiór w znaczeniu matematycznym. Jeśli rozważany układ to moneta, przestrzeń stanów stanowi zbiór składający się z dwóch elementów, O i R. Używając oznaczeń z teorii zbiorów, możemy go zapisać jako {O, R}. Jeśli układ jest sześcienną kostką, to przestrzeń stanów ma sześć elementów, zapisywanych jako {1, 2, 3, 4, 5, 6}. Logikę teorii zbiorów nazywa się *logiką Boole'a*. Logika Boole'a to sformalizowane podejście do dobrze znanej klasycznej logiki opartej na koncepcji zdań logicznych.

Podstawową ideą występującą w logice Boole'a jest pojęcie prawdziwości zdania. Zdanie logiczne może być *prawdziwe* albo *fałszywe*. Żadna pośrednia możliwość nie wchodzi w grę. Wiąże się z tym funkcjonujące w teorii zbiorów pojęcie podzbioru. Z grubsza rzecz biorąc, zdanie logiczne jest prawdziwe dla wszystkich elementów odpowiadającego mu podzbioru i fałszywe dla wszystkich elementów, które do tego zbioru nie należą. Jeśli na przykład badany zbiór przedstawia możliwe stany kostki, możemy rozważyć zdanie:

A: na kostce wypadła liczba nieparzysta.

Odpowiadający mu podzbiór, {1, 3, 5}, zawiera trzy elementy.

Inne zdanie mówi:

B: na kostce wypadła liczba mniejsza niż 4.

Tym razem odpowiedni podzbiór zawiera stany {1, 2, 3}.

Każde zdanie logiczne ma swoje zaprzeczenie (zwane też negacją), na przykład:

***nie** A: na kostce nie wypadła liczba nieparzysta.*

Podzbiór odpowiadający temu zaprzeczeniu to {2, 4, 6}.

Pewne reguły pozwalają nam łączyć proste zdania logiczne w bardziej złożone. Najważniejsze z nich to spójniki **lub**, **i** oraz **nie**. Przed chwilą mieliśmy do czynienia z przykładem użycia **nie**, które stosuje się do pojedynczego zdania czy też podzbioru. Kolejny spójnik, **i**, ma bardzo prosty charakter, a stosuje się go do pary zdań[4]. Oznacza on, że oba te zdania są prawdziwe. Kiedy zastosujemy to stwierdzenie do dwóch podzbiorów, **i** prowadzi do podzbioru zawierającego elementy należące do obu podzbiorów początkowych, czyli ich *części wspólnej* czy też *przecięcia*. W przykładzie z kostką częścią wspólną podzbiorów *A* i *B* jest podzbiór składający się z elementów, które są jednocześnie nieparzyste i mniejsze od 4. Ilustracja 1.5 za pomocą diagramu Venna pokazuje, jak działa odpowiedni mechanizm.

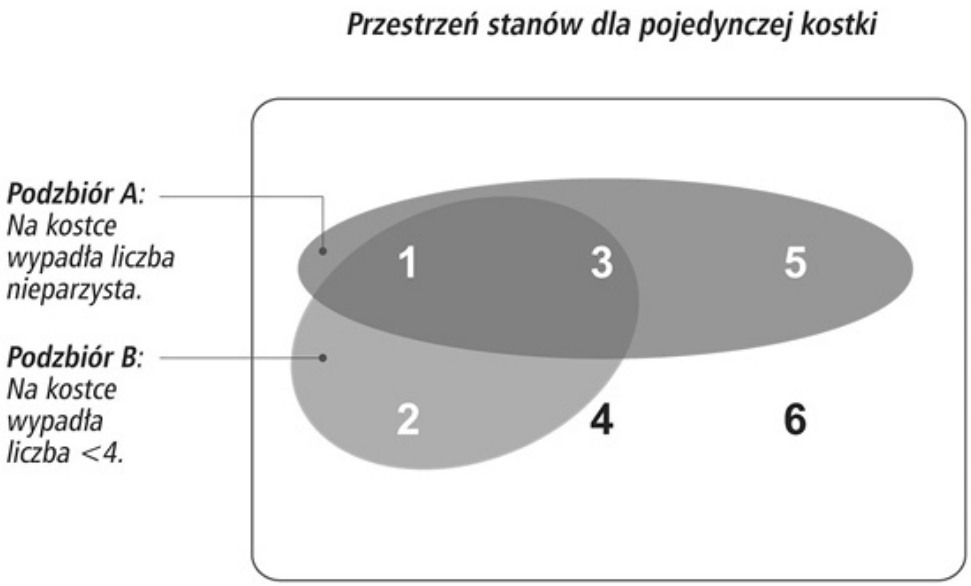
Zasada rządząca spójnikiem **lub** przypomina tę dla **i**, ale zawiera jedną dodatkową subtelność. W potocznym języku słowa „lub” używamy zwykle w sensie wyłączności: chodzi o to, że powstałe zdanie złożone jest prawdziwe, jeśli jedno bądź drugie ze zdań składowych jest prawdziwe, ale nie wtedy, gdy prawdziwe są oba składniki. W logice Boole’a używa się innej wersji **lub**, czyli takiej,

w której zdanie złożone jest prawdziwe, gdy prawdziwy jest którykolwiek ze składników bądź obydwa składniki. Zgodnie z tą wersją **lub** zdanie logiczne

*Albert Einstein odkrył teorię względności **lub** Isaac Newton był Anglikiem*

jest prawdziwe, podobnie jak zdanie

*Albert Einstein odkrył teorię względności **lub** Isaac Newton był Rosjaninem*.



Ilustracja 1.5. Przykład klasycznego modelu przestrzeni stanów. Podzbiór A odpowiada zdaniu: „na kostce wypadła liczba nieparzysta". Podzbiór B – zdaniu „na kostce wypadła liczba <4". Ciemniejsze zacieniowanie przedstawia część wspólną A i B, która odpowiada zdaniu (A **i** *B). Białe liczby to elementy sumy A z B, odpowiadającej zdaniu (A* **lub** *B).*

Zdanie połączone spójnikiem **lub** jest fałszywe tylko wtedy, jeśli fałszywe są oba zdania składowe. Przykładem takiej sytuacji jest zdanie

Albert Einstein odkrył Amerykę[5] ***lub*** *Isaac Newton był Rosjaninem*.

Spójnik **lub** interpretuje się w języku teorii zbiorów jako sumę dwóch podzbiorów: oznacza on wtedy podzbiór zawierający wszystkie elementy jednego bądź obydwu zbiorów składowych. W przykładzie z kostką A **lub** B odpowiada podzbiorowi {1, 2, 3, 5}.

1.6 TESTOWANIE ZDAŃ KLASYCZNYCH

Wróćmy teraz do prostego układu kwantowego składającego się z pojedynczego spinu i rozważmy różne zdania, których prawdziwość moglibyśmy zweryfikować przy użyciu instrumentu A. Zacznijmy od następujących dwóch zdań:

A: Składowa spinu odpowiadająca osi z *jest równa +1.*

B: Składowa spinu odpowiadająca osi x *jest równa +1.*

Każde z tych zdań ma sens i może zostać przetestowane za pomocą ustawienia instrumentu A wzdłuż odpowiedniej osi. Podobnie sensowne są ich zaprzeczenia – na przykład zaprzeczenie pierwszego zdania to

nie *A: Składowa spinu odpowiadająca osi* z *jest równa –1.*

Rozważmy jednak teraz zdania złożone:

(A **lub** *B): Składowa spinu odpowiadająca osi* z *jest równa +1* **lub** *składowa spinu odpowiadająca osi* x *jest równa +1.*

(A **i** *B): Składowa spinu odpowiadająca osi* z *jest równa +1* **i** *składowa spinu odpowiadająca osi* x *jest równa +1.*

Zastanówmy się, jak przetestowalibyśmy zdanie (*A* **lub** *B*). Gdyby spiny zachowywały się zgodnie z mechaniką klasyczną – co oczywiście jest nieprawdą – moglibyśmy postępować w następujący sposób[6]:

• Delikatnie mierzymy σ_z i zapisujemy uzyskany wynik. Jeśli było to +1, to skończyliśmy: zdanie (*A* **lub** *B*) jest prawdziwe. Jeśli $\sigma_z = -1$, to przechodzimy do następnego kroku.

• Delikatnie mierzymy σ_x. Jeśli otrzymaliśmy +1, to zdanie (*A* **lub** *B*) jest prawdziwe. Jeśli nie, to ani σ_z, ani σ_x nie były równe +1 i zdanie (*A* **lub** *B*) jest fałszywe.

Istnieje jednak też alternatywna procedura, polegająca na zamianie kolejności obu pomiarów. Aby podkreślić to odwrócenie kolejności, będziemy zapisywać badane tym razem zdanie jako (*B* **lub** *A*):

• Delikatnie mierzymy σ_x i zapisujemy uzyskany wynik. Jeśli było to +1, to skończyliśmy: zdanie (*B* **lub** *A*) jest prawdziwe. Jeśli $\sigma_z = -1$, to przechodzimy do następnego kroku.

• Delikatnie mierzymy σ_z. Jeśli otrzymaliśmy +1, to zdanie (*B* **lub** *A*) jest prawdziwe. Jeśli nie, to ani σ_x, ani σ_z nie były równe +1 i zdanie (*B* **lub** *A*) jest fałszywe.

W fizyce klasycznej oba przypadki dają tę samą odpowiedź. Wynika to z faktu, że pomiary mogą być tak delikatne, jak tylko zażądamy – tak delikatne, że nie wpływają na wyniki kolejnych pomiarów. Tak więc zdanie (*A* **lub** *B*) ma takie samo znaczenie jak zdanie (*B* **lub** *A*).

1.7 TESTOWANIE ZDAŃ KWANTOWYCH

Teraz zajmiemy się kwantowym światem, który opisałem wcześniej. Wyobraźmy sobie sytuację, w której ktoś (albo coś) w tajemnicy przed nami przygotował spin w stanie $\sigma_z = +1$. Naszym zadaniem

jest teraz stwierdzenie, za pomocą instrumentu A, czy zdanie (*A* **lub** *B*) jest prawdziwe czy fałszywe. Spróbujemy wykorzystać do tego procedury przedstawione powyżej.

Zaczynamy od zmierzenia σ_z. Ponieważ nieznana nam siła zajęła się wcześniej przygotowaniem układu, przekonamy się, że $\sigma_z = +1$. Nie musimy kontynuować eksperymentu: zdanie (*A* **lub** *B*) jest prawdziwe. Tak czy inaczej możemy jednak przetestować σ_x, po prostu by zaspokoić naszą ciekawość. Odpowiedzi nie da się przewidzieć. Losowo przekonamy się, że $\sigma_x = +1$ lub $\sigma_x = -1$. Żaden z tych wyników nie ma oczywiście wpływu na prawdziwość zdania (*A* **lub** *B*).

Teraz jednak odwróćmy kolejność wykonywania pomiarów. Tak jak to zrobiliśmy poprzednio, odwróconą procedurę określimy jako (*B* **lub** *A*) i zacznie się ona od pomiaru σ_x. Ponieważ nieznana siła ustawiła spin jako równy +1 wzdłuż osi *z*, wynik pomiaru σ_x jest losowy. Jeśli okaże się, że $\sigma_x = +1$, to nasze zadanie jest zakończone: zdanie (*B* **lub** *A*) jest prawdziwe. Przypuśćmy jednak, że otrzymaliśmy przeciwny wynik, $\sigma_x = -1$. Spin jest więc teraz zorientowany w kierunku $-x$. Zatrzymajmy się tu na moment, by dobrze zrozumieć, co się właśnie wydarzyło. W wyniku pierwszego pomiaru spin przestał znajdować się w stanie $\sigma_z = +1$. Teraz jest w nowym stanie, określonym albo przez warunek $\sigma_x = +1$, albo przez warunek $\sigma_x = -1$. Zastanów się nad tym przez chwilę. Nie sposób przecenić istotności tej uwagi.

Jesteśmy zatem gotowi do przetestowania drugiej połowy zdania (*B* **lub** *A*). Ustawmy instrument wzdłuż osi *z* i zmierzmy σ_z. Zgodnie z regułami mechaniki kwantowej otrzymany wynik będzie losowo równy ±1. Oznacza to, że z dwudziestopięcioprocentowym prawdopodobieństwem w eksperymencie dostaniemy wyniki $\sigma_x = -1$ i $\sigma_z = -1$. Inaczej mówiąc, z prawdopodobieństwem równym 1/4 przekonamy się, że zdanie (*B* **lub** *A*) jest fałszywe: stanie się tak, pomimo iż początkowo nieznany czynnik zapewnił, że $\sigma_z = +1$.

W tym przykładzie widać jasno, że kwantowe **lub** nie jest symetryczne. Prawdziwość zdania (*A* **lub** *B*) może zależeć od kolejności, w jakiej zweryfikujemy prawdziwość jego składowych. Nie jest to pomijalny drobiazg: ten fakt oznacza nie tylko, że prawa fizyki kwantowej różnią się od swoich klasycznych odpowiedników, ale i że same podstawy logiki w fizyce kwantowej przybierają odmienny charakter.

Co można powiedzieć o zdaniu (*A* **i** *B*)? Przypuśćmy, że w pierwszym pomiarze otrzymamy wynik $\sigma_z = +1$, a w drugim $\sigma_x = +1$. Oczywiście może się tak zdarzyć. Chcielibyśmy wtedy uznać, że zdanie (*A* **i** *B*) jest prawdziwe. W nauce jednak, a zwłaszcza w fizyce, prawdziwość jakiegoś stwierdzenia oznacza, że można je pozytywnie zweryfikować w kolejnych eksperymentach. W fizyce klasycznej możliwość wykonywania delikatnych obserwacji oznacza, że kolejne eksperymenty nie wpływają w żaden sposób na stan układu i ich wyniki potwierdzą ten otrzymany za pierwszym razem. Moneta, która leży orłem do góry, nie obróci się nagle na drugą stronę tylko dlatego, że ją zaobserwowaliśmy – przynajmniej nie w świecie klasycznym. Z punktu widzenia mechaniki kwantowej drugi pomiar ($\sigma_x = +1$) niszczy możliwość weryfikacji wyniku pierwszego pomiaru. Kiedy tylko spin zostanie przygotowany wzdłuż osi *x*, następujący potem pomiar σ_z da losowy wynik. Wobec tego zdanie (*A* **i** *B*) jest nieweryfikowalne: druga część eksperymentu ingeruje w możliwość potwierdzenia wyniku otrzymanego w jego pierwszej części.

Jeśli wiecie już trochę o mechanice kwantowej, pewnie zorientowaliście się, że to, o czym mówimy, ma związek z zasadą nieoznaczoności. Zasady nieoznaczoności nie stosuje się wyłącznie do położenia i pędu (czy też prędkości); dotyczy ona wielu par mierzalnych wielkości. W odniesieniu do spinu stosuje się do zdań dotyczących dwóch różnych składowych σ. W wypadku położenia i pędu zdania, które możemy rozważać, to:

Pewna cząstka ma położenie *x*.

Ta sama cząstka ma pęd *p*.

Możemy z nich stworzyć dwa różne zdania złożone:

Cząstka ma położenie *x* **i** cząstka ma pęd *p*.

Cząstka ma położenie *x* **lub** cząstka ma pęd *p*.

Choć zdania te mogą brzmieć nieco dziwnie, mają konkretne znaczenie w języku polskim, a także w fizyce klasycznej. W fizyce kwantowej jednak pierwsze z nich jest całkowicie pozbawione sensu (nie jest nawet błędne), a drugie oznacza coś innego, niż mogłoby ci się wydawać. Wszystko sprowadza się do głębokiej logicznej różnicy między klasyczną a kwantową koncepcją stanu układu. Wyjaśnienie kwantowej koncepcji stanu będzie wymagało wprowadzenia pewnych abstrakcyjnych pojęć matematycznych, teraz więc zatrzymamy nasze rozważania, by przedstawić krótkie interludium dotyczące liczb zespolonych i przestrzeni wektorowych. Potrzeba stosowania wielkości zespolonych stanie się jasna później, przy studiowaniu matematycznej reprezentacji stanów spinu.

1.8 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – LICZBY ZESPOLONE

Każdy, kto dotarł już tak daleko w serii „Teoretyczne minimum”, wie coś o liczbach zespolonych. Niemniej jednak przez najbliższych kilka akapitów przypomnę podstawowe wiadomości ich dotyczące. Ilustracja 1.6 przedstawia niektóre z nich.

Liczba zespolona *z* to suma liczby rzeczywistej i liczby urojonej. Możemy ją zapisać jako

$$z = x + iy,$$

gdzie *x* oraz *y* to liczby rzeczywiste, a $i^2 = -1$. Liczby zespolone można dodawać, mnożyć i dzielić zgodnie ze zwykłymi regułami arytmetyki. Można je również przedstawiać jako punkty na płaszczyźnie o współrzędnych równych odpowiednio *x*, *y*. Inne przedstawienie wykorzystuje współrzędne biegunowe:

$$z = re^{i\theta} = r(\cos\theta + i\sin\theta)$$

Dodawanie liczb zespolonych jest bardzo łatwe, gdy są one zapisane przy użyciu składowych: po prostu dodajemy składowe do siebie. Mnożenie wygląda z kolei bardzo prosto we współrzędnych biegunowych: wystarczy pomnożyć promienie i dodać kąty:

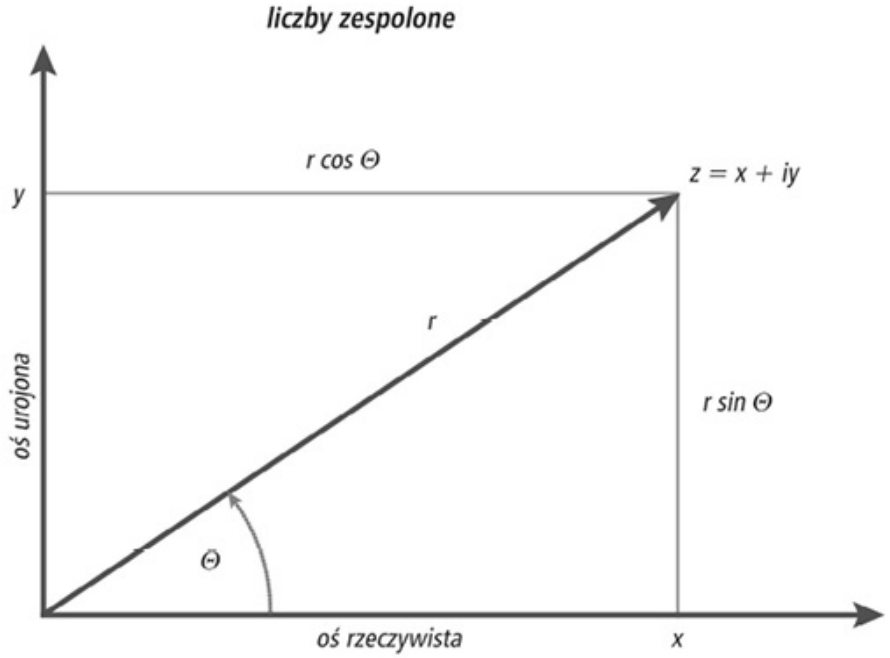
$$(r_1 e^{i\theta_1})(r_2 e^{i\theta_2}) = (r_1 r_2)e^{i(\theta_1+\theta_2)}$$

Każdą liczbę zespoloną *z* cechuje sprzężenie *z**, które powstaje po prostu przez zmianę znaku części urojonej. Jeśli

$$z = x + iy = re^{i\theta}$$

to

$$z^* = x - iy = re^{-i\theta}$$



Ilustracja 1.6. Dwa typowe sposoby przedstawiania liczb zespolonych. We współrzędnych kartezjańskich x i y to odpowiednio pozioma (rzeczywista) i pionowa (urojona) składowa. We współrzędnych biegunowych r to promień, a Θ kąt tworzony z osią x. W każdym z tych przedstawień do opisu pojedynczej liczby zespolonej używa się dwóch liczb rzeczywistych.

Pomnożenie każdej liczby zespolonej przez jej sprzężenie daje w wyniku nieujemną liczbę rzeczywistą:

$$z^* z = r^2$$

To oczywiście prawda, że każde sprzężenie samo jest liczbą zespoloną, ale często przydaje się traktowanie *z* i *z** tak, jakby należały do oddzielnych, „dualnych do siebie" zbiorów liczb. Słowo „dualny" oznacza tu, że każdemu *z* odpowiada dokładnie jedno *z** i podobnie jest na odwrót.

Istnieje pewna szczególna klasa liczb zespolonych, które będę nazywał „czynnikami fazowymi" czy też po prostu „fazami". Czynnik

fazowy to liczba zespolona, dla której $r = 1$. Jeśli z jest czynnikiem fazowym, to zachodzą następujące równości:

$$z^* z = 1$$

$$z = e^{i\theta}$$

$$z = \cos\theta + i\sin\theta$$

1.9 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – PRZESTRZENIE WEKTOROWE

1.9.1 Aksjomaty

W układzie klasycznym przestrzeń stanów to zbiór (zbiór możliwych stanów), a logika fizyki klasycznej to logika Boole'a. Wydaje się to oczywiste i trudno wyobrazić sobie jakąś inną możliwość. Niemniej jednak działanie rzeczywistego świata opiera się na zupełnie innych zasadach, przynajmniej wtedy, gdy mechanika kwantowa odgrywa istotną rolę. Przestrzeń stanów układu kwantowego nie jest zbiorem[7]; jest raczej *przestrzenią wektorową*. Związki między elementami przestrzeni wektorowej różnią się od tych między elementami zbioru, co więcej, zmienia się również logika zdań.

Zanim opowiem o przestrzeniach wektorowych, muszę wyjaśnić nasze rozumienie pojęcia *wektor*. Jak wiecie, wykorzystujemy to określenie do opisu obiektu znajdującego się w zwykłej przestrzeni i mającego wielkość oraz kierunek. Tak rozumiane wektory mają trzy składowe, odpowiadające trzem przestrzennym współrzędnym. Chciałbym, żebyście teraz kompletnie zapomnieli o takiej koncepcji wektora. Od tej pory kiedy tylko będę chciał powiedzieć coś o obiekcie zwykłej przestrzeni, mającym wielkość i kierunek, będę

wyraźnie nazywał go *3-wektorem*. Matematyczna przestrzeń wektorowa to abstrakcyjna konstrukcja, która może, ale nie musi, mieć coś wspólnego ze zwykłą przestrzenią. Może mieć dowolną liczbę wymiarów, od jednego do nieskończoności, a jej składowe mogą być liczbami całkowitymi, liczbami rzeczywistymi albo nawet bardziej ogólnymi tworami.

Przestrzenie wektorowe, których będziemy używać do definiowania stanów w mechanice kwantowej, nazywa się *przestrzeniami Hilberta*. Nie podamy tu ich formalnej matematycznej definicji, ale i tak znajomość tego określenia może ci się przydać. Kiedy w studiowaniu mechaniki kwantowej natkniesz się na pojęcie „przestrzeń Hilberta", to będzie chodziło o przestrzeń stanów. Przestrzeń Hilberta może być skończenie wymiarowa lub nieskończenie wymiarowa.

W mechanice kwantowej przestrzeń wektorowa składa się z elementów $|A\rangle$ nazywanych *wektorami ket* albo po prostu *ketami*. Podamy teraz aksjomaty, których będziemy używać do zdefiniowania przestrzeni stanów układu kwantowego (*z* i *w* oznaczają poniżej dowolne liczby zespolone):

1. Suma dwóch wektorów ket jest wektorem ket:

$$|A\rangle + |B\rangle = |C\rangle$$

2. Dodawanie wektorów jest przemienne:

$$|A\rangle + |B\rangle = |B\rangle + |A\rangle$$

3. Dodawanie wektorów jest łączne:

$$\{|A\rangle + |B\rangle\} + |C\rangle = |A\rangle + \{|B\rangle + |C\rangle\}$$

4. Istnieje jedyny wektor 0, który ma tę własność, że gdy dodamy go do dowolnego ketu, otrzymujemy ten sam ket:

$$|A\rangle + 0 = |A\rangle$$

5. Dla każdego ketu $|A\rangle$ istnieje dokładnie jeden ket $-|A\rangle$ taki, że

$$|A\rangle + (-|A\rangle) = 0$$

6. Jeśli mamy dowolny ket $|A\rangle$ i dowolną liczbę zespoloną *z*, to możemy je przez siebie pomnożyć, w wyniku otrzymując nowy ket. Mnożenie przez liczby zespolone jest liniowe:

$$|zA\rangle = z|A\rangle = |B\rangle$$

7. Zachodzą prawa rozdzielności:

$$z\{|A\rangle + |B\rangle\} = z|A\rangle + z|B\rangle$$

$$\{z + w\}|A\rangle = z|A\rangle + w|A\rangle$$

Aksjomaty 6 i 7 określa się czasem łącznie *liniowością*. Zwykłe 3-wektory spełniają powyższe aksjomaty, z jednym wyjątkiem: aksjomat 6 pozwala nam pomnożyć wektor przez dowolną liczbę zespoloną. Zwykłe 3-wektory można mnożyć przez liczby rzeczywiste (dodatnie, ujemne bądź równe zeru), ale mnożenie przez liczby zespolone jest niezdefiniowane. O 3-wektorach można myśleć jako o elementach tworzących rzeczywistą przestrzeń wektorową, a o ketach jako o elementach tworzących zespoloną przestrzeń wektorową. Nasza definicja wektorów ket jest dość abstrakcyjna. Jak się wkrótce przekonamy, istnieją różne konkretne sposoby ich przedstawiania.

1.9.2 Funkcje i wektory kolumnowe

Przyjrzyjmy się kilku konkretnym przykładom zespolonych przestrzeni wektorowych. Na początku rozważmy zbiór wszystkich ciągłych funkcji o wartościach zespolonych zależnych od zmiennej *x*. Będziemy je oznaczać jako *A*(*x*). Dwie takie funkcje można do siebie dodać, każdą z nich można też pomnożyć przez liczbę zespoloną. Możesz sprawdzić, że te działania spełniają wszystkie siedem aksjomatów. Ten przykład powinien cię przekonać, że mówimy o czymś ogólniejszym od trójwymiarowych strzałek.

Kolejnym konkretnym przykładem są dwuwymiarowe wektory kolumnowe. Konstruujemy je, układając dwie liczby zespolone, α_1 i α_2, jedna nad drugą, w następujący sposób:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

i utożsamiając taki „stosik” z wektorem ket $|A\rangle$. Liczby zespolone α nazywamy składowymi $|A\rangle$. Dwa wektory kolumnowe można do siebie dodać, po prostu dodając do siebie odpowiednie składowe:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 + \beta_1 \\ \alpha_2 + \beta_2 \end{pmatrix}$$

Wektor kolumnowy można też pomnożyć przez liczbę zespoloną *z*, mnożąc przez *z* każdą składową z osobna:

$$z\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z\alpha_1 \\ z\alpha_2 \end{pmatrix}$$

Podobnie wygląda konstrukcja kolumnowych przestrzeni wektorowych o dowolnej liczbie wymiarów. Na przykład pięciowymiarowy wektor kolumnowy wygląda tak:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \end{pmatrix}$$

Zwykle staramy się nie mieszać wektorów różnych wymiarów.

1.9.3 Bra i kety

Jak przekonaliśmy się wcześniej, liczby zespolone mają swoje dualne odpowiedniki, będące po prostu sprzężonymi liczbami zespolonymi. Podobnie każda zespolona przestrzeń wektorowa ma obiekt dualny, będący w gruncie rzeczy sprzężoną zespoloną przestrzenią wektorową. Każdemu wektorowi ket $|A\rangle$ odpowiada wektor „bra" w przestrzeni dualnej, oznaczany $\langle A|$.

Skąd się wzięły dziwne terminy „bra" i „ket"? Wkrótce zdefiniujemy iloczyny skalarne wektorów bra i ket, wykorzystując wyrażenia postaci $\langle B|A\rangle$, tworzące nawiasy – a po angielsku nawias to *bracket*, czyli inaczej „bra-ket". Iloczyny skalarne odgrywają w matematycznej maszynerii rządzącej mechaniką kwantową niezwykle istotną rolę, są też ważne przy ogólnych charakteryzacjach przestrzeni wektorowych. Wektory bra spełniają te same aksjomaty co wektory ket, ale warto pamiętać o dwóch faktach dotyczących związków między bra a ketami:

– Przypuśćmy, że $\langle A|$ jest bra odpowiadającym ketowi $|A\rangle$, a $\langle B|$ jest bra odpowiadającym ketowi $|B\rangle$. Wówczas bra odpowiadający

$$|A\rangle + |B\rangle$$

to

$$\langle A| + \langle B|$$

– Jeśli *z* to liczba zespolona, to *nieprawdą* jest, że bra odpowiadający $z|A\rangle$ to $\langle A|z$. Trzeba pamiętać o sprzężeniu zespolonym: bra odpowiadający

$$z|A\rangle$$

to

$$\langle A|z*$$

Jeżeli zaś kety są przedstawiane jako wektory kolumnowe, dualne wektory bra przedstawia się jako wektory wierszowe o wyrazach będących sprzężonymi liczbami zespolonymi. I tak jeśli ket $|A\rangle$, to kolumna

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \end{pmatrix}$$

a odpowiadający mu bra $\langle A|$ przedstawiamy w postaci wiersza

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 * & \alpha_2 * & \alpha_3 * & \alpha_4 * & \alpha_5 \end{pmatrix}$$

1.9.4 Iloczyny skalarne

Z pewnością spotkaliście się już z oznaczanym kropką iloczynem skalarnym definiowanym dla zwykłych 3-wektorów. *Iloczyn skalarny*

to analogiczna operacja łącząca ze sobą bra i kety: zawsze występuje w nim wektor bra i wektor ket, a zapisujemy go następująco:

$$\langle B|A\rangle$$

W wyniku otrzymujemy liczbę zespoloną. Aksjomaty opisujące iloczyny skalarne nietrudno odgadnąć:

1. Są liniowe:

$$\langle C|\{|A\rangle+|B\rangle\}=\langle C|A\rangle+\langle C|B\rangle$$

2. Zamiana bra z ketem odpowiada sprzężeniu zespolonemu:

$$\langle B|A\rangle=\langle A|B\rangle^*$$

***

<u>Ćwiczenie 1.1</u>

a) **Korzystając z aksjomatów iloczynów skalarnych, udowodnij, że**

$$\{\langle A|+\langle B|\}|C\rangle=\langle A|C\rangle+\langle B|C\rangle$$

b) Udowodnij, że $\langle A|A\rangle$ jest liczbą rzeczywistą.

***

Kiedy stosujemy konkretne przedstawienie bra i ketów za pomocą wektorów wierszowych i kolumnowych, iloczyn skalarny definiuje się

za pomocą składowych:

$$\langle B|A\rangle = \left(\beta_1 * \beta_2 * \beta_3 * \beta_4 * \beta_5\right)\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\\ \alpha_3\\ \alpha_4\\ \alpha_5\end{pmatrix}$$

$$= \beta_1^*\alpha_1 + \beta_2^*\alpha_2 + \beta_3^*\alpha_3 + \beta_4^*\alpha_4 + \beta_5^*\alpha_5$$

(1.2)

Ogólna formuła przypomina więc tę dla 3-wektorów: trzeba dodać do siebie iloczyny odpowiednich składowych wektorów, których iloczyn skalarny chcemy obliczyć.

***

Ćwiczenie 1.2. Wykaż, że iloczyn skalarny zdefiniowany wzorem 1.2 spełnia wszystkie aksjomaty, których wymagamy od iloczynu skalarnego.

***

Przy użyciu iloczynów skalarnych możemy zdefiniować pewne pojęcia znane nam dobrze dla zwykłych 3-wektorów:

• *wektor znormalizowany*: mówimy, że wektor jest znormalizowany, jeśli jego iloczyn skalarny z samym sobą jest równy 1. Wektory znormalizowane spełniają więc równość:

$$\langle A|A\rangle = 1$$

Dla zwykłych 3-wektorów określenie *wektor znormalizowany* zastępuje się zwykle terminem *wektor jednostkowy*, czyli wektor o długości 1.

• *wektory ortogonalne:* mówimy, że dwa wektory są do siebie ortogonalne (czy też prostopadłe), jeśli ich iloczyn skalarny jest równy 0. $|A\rangle$ i $|B\rangle$ są do siebie ortogonalne, jeśli

$$\langle B|A\rangle = 0$$

Odpowiada to stwierdzeniu, że dwa 3-wektory są do siebie prostopadłe, jeśli ich zwykły iloczyn skalarny jest równy 0.

1.9.5 Bazy ortonormalne

Kiedy pracujemy ze zwykłymi 3-wektorami, bardzo przydatne okazuje się wprowadzenie zbioru trzech wzajemnie prostopadłych wektorów jednostkowych i korzystanie z nich jako bazy, przy użyciu której można skonstruować dowolny wektor. Prostym przykładem są jednostkowe 3-wektory skierowane odpowiednio zgodnie z osiami *x*, *y* i *z*. Zwykle oznacza się je przez $\hat{i}$, $\hat{j}$ i $\hat{k}$. Każdy ma długość jeden i jest prostopadły do dwóch pozostałych. Gdybyście próbowali znaleźć czwarty niezerowy wektor, który jest prostopadły do tych trzech, przekonalibyście się, że nie istnieje – a przynajmniej nie w trzech wymiarach. Jeśli jednak przestrzeń miałaby więcej wymiarów, byłoby w niej więcej wektorów bazowych. Wymiar przestrzeni można zdefiniować jako maksymalną możliwą liczbę należących do niej wzajemnie prostopadłych niezerowych wektorów.

Rzecz jasna, w wyborze konkretnych osi *x*, *y* i *z* nie ma nic szczególnego. Jeśli tylko wektory bazowe mają długość 1 i są do siebie prostopadłe, mówimy, że tworzą one *bazę ortonormalną*.

Zasada ta pozostaje w mocy dla zespolonych przestrzeni wektorowych. Zawsze można zacząć od jakiegoś wektora znormalizowanego, a następnie szukać drugiego niezerowego

wektora, który byłby do niego prostopadły. Jeśli się to uda, to przestrzeń jest co najmniej dwuwymiarowa. Potem można szukać trzeciego wektora, czwartego i tak dalej. W końcu może się zdarzyć tak, że nie będzie już żadnych ortogonalnych kandydatów. Maksymalna liczba niezerowych wektorów prostopadłych do siebie parami to wymiar przestrzeni. W wypadku wektorów kolumnowych wymiar to po prostu liczba wyrazów w kolumnie.

Rozważmy teraz przestrzeń *N*-wymiarową z pewną szczególną bazą ortonormalną[8] złożoną z wektorów ket oznaczonych $|i\rangle$, gdzie wskaźnik *i* przebiega liczby od 1 do *N*. Przypuśćmy, że wektor $|A\rangle$ daje się zapisać jako suma wektorów bazowych:

$$|A\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle$$

(1.3)

α_i są tu liczbami zespolonymi, nazywanymi *składowymi* wektora. By je wyznaczyć, wystarczy policzyć iloczyn skalarny obu stron z wektorem bazowym bra postaci $\langle j|$:

$$\langle j|A\rangle = \sum_i \alpha_i \langle j|i\rangle$$

(1.4)

W następnym kroku korzystamy z tego, że wektory bazowe są ortonormalne. Oznacza to, że $\langle j|i\rangle = 0$, gdy *i* nie jest równe *j* oraz $\langle j|i\rangle = 1$, gdy *i = j*. Inaczej mówiąc, $\langle j|i\rangle = \delta_{ij}$. Powoduje to, że suma w równaniu 1.4 redukuje się do pojedynczego wyrazu:

$$\langle j|A\rangle = \alpha_j$$

(1.5)

Przekonaliśmy się więc, że składowe wektora to po prostu jego iloczyny skalarne z odpowiednimi wektorami bazowymi. Równanie 1.3 daje się teraz przepisać w eleganckiej postaci

$$|A\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|A\rangle$$

1 Od angielskiego *qubit*, czyli *quantum bit* (przyp. tłum.).

2 Określenie „czarna skrzynka" oznacza, że nie wiemy, co znajduje się wewnątrz instrumentu pomiarowego ani jak on działa. Możesz jednak spać spokojnie, nie ma tam żadnego kota.

3 Standardowym sposobem oznaczania wektora jednostkowego (o jednostkowej długości) jest umieszczanie „daszku" nad symbolem przedstawiającym ten wektor.

4 **I** można też zdefiniować dla większej liczby zdań, ale my będziemy rozważać za każdym razem tylko parę zdań. To samo dotyczy spójnika **lub**.

5 Cóż, być może Einstein faktycznie odkrył Amerykę. Nie był jednak w tym pierwszy.

6 Przypomnijmy, że klasyczne znaczenie σ różni się od znaczenia w mechanice kwantowej. Klasycznie σ to zwykły wektor w trójwymiarowej przestrzeni, a σ_X i σ_Z przedstawiają jego przestrzenne składowe.

7 Ściśle mówiąc, przestrzenie stanów nadal można oczywiście traktować jako zbiory, nie będziemy się jednak koncentrować na ich własnościach związanych z teorią zbiorów.

8 W matematyce nie wymaga się, by wektory bazowe były ortonormalne. W mechanice kwantowej jednak zwykle tak jest. Kiedy w tej książce używamy określenia „baza", mamy zawsze na myśli bazę ortonormalną.

WYKŁAD 2

Stany kwantowe

– To bardzo dziwne, ale piwo sprawiło, że przestało mi się kręcić w głowie. W jakim jesteśmy stanie? – odezwał się Art.
– Sam chciałbym wiedzieć. Czy to ważne? – zapytał Lenny.
– Być może. Myślę, że już nie w Kalifornii.

2.1 STANY I WEKTORY

W fizyce klasycznej to, że znamy stan układu, oznacza, iż wiemy wszystko, co jest potrzebne, by przewidzieć jego przyszłość. Jak już zauważyliśmy w poprzednim wykładzie, układy kwantowe nie są zupełnie przewidywalne. Stany kwantowe mają najwyraźniej inne znaczenie niż stany klasyczne. W skrócie można powiedzieć, że to, iż znamy jakiś stan kwantowy, oznacza, że wiemy tyle, ile to tylko możliwe o tym, w jaki sposób układ został przygotowany. W poprzednim rozdziale mówiliśmy o wykorzystaniu instrumentu pomiarowego do przygotowania stanu spinu. Tak naprawdę domyślnie przyjęliśmy, że nie istnieje już więcej danych o stanie spinu, które trzeba (lub można) określić.

Naturalne pytanie, jakie możemy sobie zadać, dotyczy tego, czy nieprzewidywalność wynika z niekompletności tego, co nazywamy stanem kwantowym. Fizycy mają na ten temat różne opinie. Przedstawimy teraz kilka z nich:

• Tak, pojęcie stanu kwantowego rozumiane w typowy sposób jest niekompletne. Istnieją „zmienne ukryte”, które – gdybyśmy mogli uzyskać do nich dostęp – zapewniłyby pełną przewidywalność. Ten pogląd ma dwie odmiany. W wersji A pomiar zmiennych ukrytych jest bardzo trudny, ale zasadniczo możliwy do przeprowadzenia. W wersji B jest on zasadniczo niemożliwy, gdyż my sami składamy się z materii kwantowomechanicznej, a więc podlegamy też ograniczeniom mechaniki kwantowej.

• Nie, pojęcie zmiennych ukrytych prowadzi nas w ślepy zaułek. Mechanika kwantowa jest ze swojej natury nieprzewidywalna i podany przez nią opis w języku rachunku prawdopodobieństwa jest możliwie najbardziej kompletny. Zadaniem fizyków jest nauczenie się, jak z niego korzystać.

Nie wiem, jak będzie brzmiała ostateczna odpowiedź na to pytanie, a nawet czy okaże się ona do czegoś przydatna. Dla naszych celów opinie konkretnych naukowców o prawdziwym znaczeniu stanu kwantowego są nieistotne. Ze względów praktycznych przyjmiemy drugie z opisanych wyżej stanowisk.

Dla stanu spinowego z wykładu pierwszego oznacza to po prostu, że kiedy instrument A działa i informuje nas, że $\sigma_z = +1$ lub $\sigma_z = -1$, to nie ma już nic więcej, o czym moglibyśmy się dowiedzieć. Podobnie jeśli obrócimy instrument A i uzyskamy wynik $\sigma_x = +1$ lub $\sigma_x = -1$, to również nie istnieje już żaden dodatkowy fakt, który moglibyśmy poznać. To samo dotyczy σ_y i każdej innej składowej spinu.

2.2 PRZEDSTAWIANIE STANÓW SPINU

Nadeszła pora, by sprawdzić, jak sobie damy radę z przedstawieniem stanów spinu za pomocą wektorów stanów. Naszym celem jest skonstruowanie reprezentacji, która zawierałaby wszystko, co wiemy o zachowaniu spinów. Na tym etapie proces ów będzie się opierał

raczej na intuicji, a nie na formalnym rozumowaniu. Spróbujemy połączyć wszystko najlepiej, jak potrafimy, opierając się na tym, czego się już dowiedzieliśmy. Postaraj się przeczytać ten fragment bardzo uważnie. Później bardzo ci się to przyda.

Zacznijmy od oznaczenia możliwych stanów spinu na trzech osiach współrzędnych. Kiedy instrument A jest skierowany wzdłuż osi *z*, dwa stany, które można przygotować, odpowiadają $\sigma_z = \pm 1$. Nazwijmy je „góra" i „dół" i oznaczmy przez $|g\rangle$ i $|d\rangle$. Tak więc kiedy instrument A jest skierowany wzdłuż osi *z* i wskazuje +1, przygotowany został stan $|g\rangle$.

Z kolei jeśli instrument jest skierowany wzdłuż osi *x* i wskazuje –1, przygotowany został stan $|l\rangle$. Nazwiemy go „lewym". Jeśli A zostanie ustawiony wzdłuż osi *y*, mogą zostać przygotowane stany $|w\rangle$ lub $|z\rangle$ („wewnętrzny" lub „zewnętrzny"). Masz już chyba pojęcie, jak to działa.

Koncepcja mówiąca, że nie istnieją żadne zmienne ukryte, ma bardzo prostą interpretację matematyczną: przestrzeń stanów dla pojedynczego spinu charakteryzują tylko dwa wymiary. To stwierdzenie warto podkreślić:

Wszystkie możliwe stany spinu można przedstawić w dwuwymiarowej przestrzeni wektorowej.

Moglibyśmy w zasadzie dowolnie[9] wybrać $|g\rangle$ i $|d\rangle$ jako dwa wektory bazowe i zapisywać jakikolwiek stan jako ich liniową superpozycję. Właśnie tak zrobimy. Oznaczmy symbolem $|A\rangle$ dowolny stan. Ostatnie stwierdzenie możemy zapisać w postaci równania:

$$|A\rangle = \alpha_g |g\rangle + \alpha_d |d\rangle$$

gdzie α_g i α_d są składowymi $|A\rangle$ odpowiadającymi bazowym kierunkom $|g\rangle$ i $|d\rangle$. Matematycznie możemy zapisać składowe $|A\rangle$ w następujący sposób:

$$\alpha_g = \langle g | A \rangle$$

$$\alpha_d = \langle d | A \rangle$$

(2.1)

Powyższe równania są bardzo abstrakcyjne, a ich znaczenie dla fizyki nie jest wcale oczywiste. Za chwilę wyjaśnimy, co się za nimi kryje. Przede wszystkim $|A\rangle$ może reprezentować każdy, przygotowany w dowolny sposób stan spinu. Składowe α_g i α_d to liczby zespolone, które same w sobie nie mają żadnego znaczenia eksperymentalnego – to ostatnie niesie ich długość. W szczególności $\alpha_g^* \alpha_g$ i $\alpha_d^* \alpha_d$ mają następujący sens:

- Jeśli założymy, że spin został przygotowany w stanie $|A\rangle$, a instrument skierowano wzdłuż *z*, to wartość $\alpha_g^* \alpha_g$ stanowi prawdopodobieństwo tego, że wartość spinu zostanie zmierzona jako $\sigma_Z = +1$. Innymi słowy, jest to prawdopodobieństwo, że pomiar dokonany wzdłuż osi *z* pokaże spin skierowany w górę.
- Podobnie $\alpha_d^* \alpha_d$ jest prawdopodobieństwem tego, że pomiar dokonany wzdłuż osi *z* pokaże spin skierowany w dół.

Wartości α, czy też równoważne im $\langle g | A \rangle$ i $\langle d | A \rangle$, nazywamy amplitudami prawdopodobieństwa. Same nie są prawdopodobieństwami. Żeby obliczyć prawdopodobieństwo, musimy podnieść do kwadratu ich długości. Inaczej mówiąc, prawdopodobieństwa tego, że zmierzony spin okaże się skierowany „w górę” czy też „w dół”, są następujące:

$$P_g = \langle A | g \rangle \langle g | A \rangle$$

$$P_d = \langle A | d \rangle \langle d | A \rangle$$

(2.2)

Zauważ, że w ogóle nie wspomnieliśmy o wartości σ_z przed pomiarem. Przed pomiarem znamy jedynie wektor $|A\rangle$, który reprezentuje potencjalne prawdopodobieństwa, ale nie rzeczywiste wartości pomiarów.

Dwie kolejne kwestie są bardzo istotne. Po pierwsze to, że $|g\rangle$ i $|d\rangle$ są względem siebie ortogonalne. Inaczej mówiąc,

$$\langle g|d\rangle = 0$$

$$\langle d|g\rangle = 0$$

(2.3)

Fizyczne znaczenie tego faktu jest następujące: jeśli spin zostanie przygotowany „w górę", to prawdopodobieństwo tego, że wykryje się go „w dół", wynosi zero. Odwrotne stwierdzenie jest również prawdziwe. Ten fakt jest na tyle istotny, że go powtórzę: dwa ortogonalne stany są fizycznie różne i wzajemnie się wykluczające. Jeśli spin jest w jednym z tych stanów, nie może znajdować się (to zerowe prawdopodobieństwo) w drugim z nich. Ma to zastosowanie do wszystkich układów kwantowych, nie tylko do spinów.

Nie należy jednak mylić ortogonalności wektorów stanu z ortogonalnymi kierunkami w przestrzeni. Tak naprawdę kierunki „w górę" i „w dół" nie są prostopadłymi kierunkami w przestrzeni, chociaż powiązane z nimi wektory stanu są ortogonalne w przestrzeni stanów.

Drugim istotnym faktem jest to, że aby całkowite prawdopodobieństwo wynosiło jeden, musi zachodzić równość

$$\alpha_g^* \alpha_g + \alpha_d^* \alpha_d = 1$$

(2.4)

Jest ona równoważna stwierdzeniu, że wektor $|A\rangle$ jest znormalizowany do wektora jednostkowego:

$$\langle A|A\rangle = 1$$

To bardzo ogólna zasada mechaniki kwantowej, mająca zastosowanie do wszystkich układów kwantowych: stan układu jest reprezentowany przez jednostkowy (znormalizowany) wektor w przestrzeni wektorowej stanów. A kwadraty długości składowych wektora stanu wzdłuż konkretnych wektorów bazowych reprezentują prawdopodobieństwo różnych wyników eksperymentów.

2.3 WZDŁUŻ OSI *X*

Wcześniej powiedzieliśmy, że dowolny stan spinu można przedstawić jako kombinację liniową wektorów bazowych $|g\rangle$ i $|d\rangle$. Spróbujmy zrobić to teraz dla wektorów $|p\rangle$ i $|l\rangle$ reprezentujących spiny przygotowane wzdłuż osi *x*. Zacznijmy od $|p\rangle$. Jak pamiętasz z wykładu 1, jeśli instrument A przygotowuje początkowo $|p\rangle$, a potem zostaje obrócony, tak by mierzyć σ_z, to prawdopodobieństwa otrzymania góry i dołu są równe. A więc $\alpha_g^* \alpha_g$ i $\alpha_d^* \alpha_d$ muszą być równe 1/2. Prostym wektorem, który spełnia ten warunek, jest

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

(2.5)

W naszym wyborze jest pewna niejednoznaczność, ale jak przekonamy się później, nie różni się ona od niejednoznaczności wyboru dokładnych kierunków osi *x* i *y*. Teraz przyjrzyjmy się

wektorowi $|p\rangle$. Oto co wiemy: kiedy spin został przygotowany w lewej konfiguracji, prawdopodobieństwa odpowiadające σ_z są znów równe 1/2. To nie wystarczy, by wyznaczyć wartości $\alpha_g^* \alpha_g$ i $\alpha_d^* \alpha_d$, ale możemy wywnioskować jeszcze jedną zależność. Wcześniej stwierdziliśmy, że $|g\rangle$ i $|d\rangle$ są ortogonalne z prostego powodu, iż jeśli spin jest skierowany w górę, z pewnością nie jest skierowany w dół. Jednak w wartościach „góra" i „dół" nie ma nic specjalnego i podobne wnioskowanie pozostaje prawdziwe dla wartości „w prawo" i „w lewo". Ściśle mówiąc: jeśli spin jest skierowany w prawo, prawdopodobieństwo tego, że jest skierowany w lewo, wynosi zero. Tak więc, analogicznie do równań 2.3, mamy:

$$\langle p|l\rangle = 0$$

$$\langle l|p\rangle = 0$$

Dzięki temu możemy zapisać $|p\rangle$ w postaci:

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

(2.6)

***

Ćwiczenie 2.1. Udowodnij, że wektor $|p\rangle$ w równaniu 2.5 jest ortogonalny do wektora $|l\rangle$ z równania 2.6.

***

Ponownie w wyborze $|l\rangle$ jest pewna niejednoznaczność. Nazywa się ją niejednoznacznością fazową. Przypuśćmy, że pomnożymy $|l\rangle$ przez dowolną liczbę zespoloną *z*. Nie będzie miało to żadnego wpływu na

to, czy $|l\rangle$ jest ortogonalne do $|p\rangle$, choć otrzymany wektor zazwyczaj nie będzie już znormalizowany (nie będzie miał jednostkowej długości). Jeśli jednak wybierzemy liczbę $z = e^{i\theta}$ (gdzie θ może być dowolną liczbą rzeczywistą), to wykonane działanie nie będzie wywierało żadnego wpływu na normalizację, ponieważ $e^{i\theta}$ ma jednostkową długość. Inaczej mówiąc, suma $\alpha_g^* \alpha_g + \alpha_d^* \alpha_d$ pozostanie równa 1. Ponieważ liczbę postaci $z = e^{i\theta}$ nazywamy czynnikiem fazowym, związaną z nią niejednoznaczność nazywamy niejednoznacznością fazową. Później przekonamy się, że żadna mierzalna wielkość nie zależy od całkowitego czynnika fazowego, dlatego przy określaniu stanów możemy go spokojnie zignorować.

2.4 WZDŁUŻ OSI *Y*

Wreszcie możemy się zająć $|w\rangle$ i $|z\rangle$ – wektorami reprezentującymi spiny skierowane wzdłuż osi *y*. Przyjrzyjmy się, jakie muszą spełniać warunki. Po pierwsze

$$\langle w|z\rangle = 0$$

(2.7)

Ten warunek mówi nam, że wektory reprezentujące „wewnątrz” i „zewnątrz” są do siebie ortogonalne, tak samo jak było to w wypadku „góry” i „dołu”. Fizyczne znaczenie tego warunku to fakt, że jeśli spin jest skierowany „do wewnątrz”, to na pewno nie jest skierowany „na zewnątrz”. Wektory $|w\rangle$ i $|z\rangle$ też są obłożone pewnymi dodatkowymi ograniczeniami. Wykorzystując zależności przedstawione w równaniach 2.1 i 2.2 oraz statystyczne wyniki naszych eksperymentów, możemy zapisać następujące równości:

$$\langle z|g\rangle\langle g|z\rangle = \frac{1}{2}$$

$$\langle z|d\rangle\langle d|z\rangle = \frac{1}{2}$$

$$\langle w|g\rangle\langle g|w\rangle = \frac{1}{2}$$

$$\langle w|d\rangle\langle d|w\rangle = \frac{1}{2}$$

(2.8)

W dwóch pierwszych równaniach rolę $|A\rangle$ z równań 2.1 i 2.2 przyjmuje $|z\rangle$. W dwóch pozostałych przejmuje ją $|w\rangle$. Warunki te oznaczają, że jeśli spin skierowany jest wzdłuż osi *y*, a potem zostaje zmierzony wzdłuż osi *z*, to prawdopodobieństwa otrzymania w wyniku „góry" i „dołu" są takie same. Należy również spodziewać się, że jeśli spin zostanie zmierzony wzdłuż osi *x*, prawdopodobieństwa uzyskania wyników „w prawo" i „w lewo" będą takie same. Prowadzi to do następujących warunków:

$$\langle z|p\rangle\langle p|z\rangle = \frac{1}{2}$$

$$\langle z|l\rangle\langle l|z\rangle = \frac{1}{2}$$

$$\langle w|p\rangle\langle p|w\rangle = \frac{1}{2}$$

$$\langle w|l\rangle\langle l|w\rangle = \frac{1}{2}$$

(2.9)

Powyższe warunki wystarczają, by określić dokładnie postać wektorów $|w\rangle$ i $|z\rangle$, pomijając oczywiście niejednoznaczność fazową. Oto otrzymany wynik:

$$|w\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle + \frac{w}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

$$|z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle - \frac{w}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

(2.10)

***

Ćwiczenie 2.2. Udowodnij, że $|w\rangle$ i $|z\rangle$ spełniają wszystkie warunki z równań 2.7, 2.8 i 2.9. Czy to jedyne takie wektory?

***

Co ciekawe, dwie składowe w równaniu 2.10 są urojone. Oczywiście od początku mówiliśmy, że przestrzeń stanów to przestrzeń wektorów zespolonych, ale do tej pory nie musieliśmy używać liczb zespolonych w obliczeniach. Czy pojawienie się ich w równaniu 2.10 wynika z wygody czy z konieczności? Okazuje się, że przy naszym podejściu do stanów spinowych nie sposób tego uniknąć. Pokazanie tego faktu jest dosyć nudne i męczące, ale kolejne konieczne do wykonania kroki okazują się bardzo proste. Kolejne ćwiczenie zawiera szkic odpowiedniego rozumowania. Konieczność użycia liczb zespolonych jest ogólną cechą mechaniki kwantowej i w dalszych częściach książki będziemy mogli zaobserwować inne przykłady tego zjawiska.

***

Ćwiczenie 2.3. Zapomnij na chwilę, że równania 2.10 dają nam roboczą definicję $|w\rangle$ i $|z\rangle$ wyrażonych za pomocą $|g\rangle$ i $|d\rangle$, i załóż, że składowe α, β, γ i δ są nieznane:

$$|w\rangle = \alpha|g\rangle + \beta|d\rangle$$

$$|z\rangle = \gamma|g\rangle + \delta|d\rangle$$

a) Skorzystaj z równania 2.8, by pokazać, że

$$\alpha^*\alpha = \beta^*\beta = \gamma^*\gamma = \delta^*\delta = \frac{1}{2}$$

b) Wykorzystaj powyższy wynik oraz równanie 2.9, aby udowodnić, że

$$\alpha^*\beta + \alpha\beta^* = \gamma^*\delta + \gamma\delta^* = 0$$

c) Wykaż, że zarówno $\alpha^*\beta$, jak i $\gamma^*\delta$ muszą być czysto urojone.

Jeśli $\alpha^*\beta$ jest liczbą czysto urojoną, to α i β nie mogą jednocześnie być rzeczywiste. Takie samo wnioskowanie stosuje się również do $\gamma^*\delta$.

***

2.5 LICZENIE PARAMETRÓW

Liczba niezależnych parametrów potrzebnych do scharakteryzowania układu zawsze niesie w sobie istotną informację. Na przykład każda

z uogólnionych współrzędnych (oznaczanych q_i), których używaliśmy w pierwszym tomie, reprezentowała niezależny stopień swobody. Wykorzystanie ich oszczędziło nam trudnego zadania rozpisywania jawnych równań opisujących fizyczne więzy występujące w rozważanym układzie. Teraz chcemy postąpić podobnie. Naszym następnym zadaniem będzie więc policzenie fizycznie różnych stanów spinu. Wykonamy to na dwa sposoby, za każdym razem otrzymując tę samą liczbę.

Pierwszy sposób jest prosty. Wystarczy skierować instrument wzdłuż dowolnego jednostkowego 3-wektora[10] $\hat{n}$ i przygotować spin o $\sigma = +1$ wzdłuż tej osi. Jeśli $\sigma = -1$, to możesz myśleć o spinie jako o skierowanym wzdłuż osi $-\hat{n}$. Tak więc dla każdego kierunku jednostkowego 3-wektora $\hat{n}$ musi istnieć pewien odpowiadający mu stan. Ile potrzeba parametrów, by określić taki kierunek? Odpowiedź brzmi: oczywiście dwa. By zdefiniować kierunek w trójwymiarowej przestrzeni, potrzeba przecież dwóch kątów[11].

Teraz rozważmy tę samą kwestię z innej perspektywy. Ogólny stan spinu definiuje się za pomocą dwóch liczb zespolonych α_g i α_d. Wydaje się więc, że mamy cztery parametry rzeczywiste, gdyż każdy parametr zespolony liczy się jako dwa rzeczywiste. Przypomnijmy jednak, że wektor musi być znormalizowany zgodnie z równaniem 2.4. Warunek normalizacyjny daje nam jedno równanie ze zmiennymi rzeczywistymi, a więc obniża liczbę parametrów do trzech.

Jak już wcześniej wspomniałem, w końcu przekonamy się, że fizyczne własności wektora stanu nie zależą od ogólnego czynnika fazowego. Oznacza to, że jeden z trzech pozostałych jeszcze parametrów jest zbędny – zostają więc tylko dwa, tyle samo, ile jest parametrów potrzebnych do określenia kierunku w trójwymiarowej przestrzeni. Tak więc wyrażenie:

$$\alpha_g |g\rangle + \alpha_d |d\rangle$$

zostawia wystarczająco dużo swobody, by opisać wszystkie możliwe kierunki spinu, chociaż eksperyment może dać nam jedynie dwie

wartości wzdłuż każdej osi.

2.6 REPREZENTACJA STANÓW SPINOWYCH ZA POMOCĄ WEKTORÓW KOLUMNOWYCH

Udało się nam już wiele dowiedzieć, korzystając z abstrakcyjnej postaci wektorów stanowych, czyli $|g\rangle$, $|d\rangle$ i tak dalej. Ten abstrakcyjny zapis pozwolił nam skoncentrować się na istotnych powiązaniach matematycznych bez konieczności martwienia się niepotrzebnymi szczegółami. Wkrótce jednak będziemy musieli wykonywać dokładne obliczenia na stanach spinowych i w tym celu zapisać wektory stanów w postaci kolumnowej. Z powodu niejednoznaczności fazowej reprezentacje kolumnowe nie są jedyne – spróbujemy znaleźć najprostsze i najbardziej wygodne w użyciu.

Jak zwykle rozpoczniemy od $|g\rangle$ i $|d\rangle$. Muszą one mieć jednostkowe długości oraz być wzajemnie ortogonalne. Para kolumn, która spełnia te warunki, to:

$$|g\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(2.11)

$$|d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(2.12)

Gdy już dysponujemy tymi wektorami kolumnowymi, stworzenie wektorów kolumnowych dla $|p\rangle$ i $|l\rangle$ przy użyciu równań 2.5 i 2.6 oraz dla $|w\rangle$ i $|z\rangle$ przy użyciu równań 2.10 będzie łatwe. Zrobimy to

w trakcie następnego wykładu, gdy przydadzą się nam konkretne wyniki.

2.7 PODSUMOWANIE

W tym wykładzie poruszyliśmy wiele kwestii. Zanim przejdziemy dalej, przyjrzyjmy się temu, co już udało nam się osiągnąć. Naszym celem było zebranie tego, co wiemy o spinach i wektorach stanów. Ustaliliśmy, w jaki sposób używać wektorów do przedstawiania stanów spinowych, a przy okazji dowiedzieliśmy się nieco o tym, jakie informacje niosą w sobie wektory stanu (a jakich nie!). Poniżej przedstawiamy krótkie podsumowanie dotychczasowych osiągnięć:

- Wykorzystując naszą wiedzę o pomiarach spinu, wybraliśmy trzy pary wzajemnie ortogonalnych wektorów bazowych. Oznaczyliśmy je $|g\rangle$ i $|d\rangle$, $|p\rangle$ i $|i\rangle$ oraz $|w\rangle$ i $|z\rangle$. Ponieważ wektory bazowe $|g\rangle$ i $|d\rangle$ reprezentują fizycznie różne stany, możemy być pewni, że są one wzajemnie ortogonalne. Inaczej mówiąc, $\langle g|d\rangle = 0$. To samo odnosi się do $|p\rangle$ i $|i\rangle$, a także do $|w\rangle$ i $|z\rangle$.
- Przekonaliśmy się, że do określenia stanu spinu wystarczą dwa parametry, a potem dowolnie wybraliśmy jedną z ortogonalnych par, $|g\rangle$ i $|d\rangle$, na nasze wektory bazowe, przy użyciu których przedstawiliśmy wszystkie stany spinu – chociaż do określenia dwóch liczb zespolonych w wektorze stanu potrzebne są cztery liczby rzeczywiste. Jak udała się nam ta sztuczka? Byliśmy na tyle bystrzy, żeby zauważyć, że nie wszystkie spośród tych czterech liczb są od siebie niezależne[12]. Ograniczenie związane z normalizacją (suma prawdopodobieństw musi wynosić 1) eliminuje jeden niezależny parametr, a niejednoznaczność fazowa (fizyka wektora stanu okazuje się niezależna od ogólnego czynnika fazowego) kolejny.
- Po wybraniu $|g\rangle$ i $|d\rangle$ na główne wektory bazowe odkryliśmy, jak przedstawić pozostałe dwie pary wektorów bazowych jako liniowe

kombinacje $|g\rangle$ i $|d\rangle$, wykorzystując dodatkowe więzy wynikające z ortogonalności i praw rządzących prawdopodobieństwami.

- Wreszcie wskazaliśmy sposób na przedstawienie naszych wektorów bazowych w postaci kolumn. Taka reprezentacja nie jest jedyna. W kolejnym wykładzie użyjemy wektorów kolumnowych $|g\rangle$ i $|d\rangle$ do wyznaczenia wektorów kolumnowych dla dwóch pozostałych baz.

Uzyskanie powyższych wyników pozwoliło nam przyjrzeć się działaniom matematycznym na wektorach stanu i dowiedzieć się nieco o tym, jak te matematyczne byty odpowiadają fizycznym spinom. Chociaż w dalszym ciągu skoncentrujemy się na spinie, podobne pojęcia i techniki mają zastosowanie również do innych układów kwantowych. Zanim przejdziesz do lektury następnego wykładu, poświęć nieco czasu na przyswojenie materiału, który do tej pory przedstawiliśmy. Jak już mówiliśmy na początku: później bardzo ci się to przyda.

9 Wybór nie jest jednak tak zupełnie dowolny. Wektory bazowe muszą być ortogonalne względem siebie.

10 Pamiętaj, że 3-wektory to nie wektory bra ani ket.

11 Przypomnijmy, że współrzędne sferyczne wykorzystują dwa kąty do przedstawienia położenia punktu w stosunku do początku układu. Długość i szerokość geograficzna stanowią kolejny przykład.

12 Możesz sobie pozwolić na pełen zadowolenia z siebie uśmiech.

WYKŁAD 3

Zasady mechaniki kwantowej

– Nie jestem taki jak ty, Lenny. Mój umysł po prostu nie został zbudowany z myślą o mechanice kwantowej – stwierdził Art.
– Ech, mój też nie. W ogóle nie umiem sobie tego wyobrazić. Powiem ci za to, że znałem kiedyś gościa, który myślał dokładnie tak jak elektron – powiedział Lenny.
– Co się z nim stało? – zapytał Art.
– Art, powiem ci tylko, że nie wyglądało to zbyt ładnie.
– Hmm, ten gen chyba zbyt długo nie przetrwał.

To prawda, nie zostaliśmy skonstruowani tak, byśmy mogli odczuwać zjawiska kwantowe, przynajmniej nie w ten sam sposób, w jaki odczuwamy nacisk czy temperaturę. Jesteśmy jednak wyjątkowo zdolni do przystosowywania się do nowych sytuacji i zdołaliśmy zastąpić brakujące zmysły, które pozwoliłyby nam odbierać mechanikę kwantową bezpośrednio, matematyką abstrakcyjną. Ostatecznie prowadzi to nawet do rozwoju nowego rodzaju intuicji.

W tym wykładzie wprowadzimy podstawowe zasady mechaniki kwantowej. Do ich opisu będziemy potrzebować pewnych nowych narzędzi matematycznych. Zabierzmy się więc do pracy.

3.1 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – OPERATORY LINIOWE

3.1.1 Maszyny i macierze

Stany w mechanice kwantowej opisujemy matematycznie jako elementy przestrzeni wektorowej. Obserwable fizyczne – czyli wielkości, które można zmierzyć – opisuje się jako operatory liniowe. Potraktujemy to jak aksjomat, a później (w rozdziale 3.1.5) przekonamy się, że operatory odpowiadające obserwablom fizycznym muszą być nie tylko liniowe, lecz także hermitowskie. Związek między operatorami a obserwablami ma dość subtelny charakter i zrozumienie go będzie od nas wymagało pewnego wysiłku.

Obserwable to wielkości, które można zmierzyć, możemy na przykład bezpośrednio zmierzyć współrzędne położenia danej cząstki, energię, pęd czy moment pędu danego układu albo pole elektryczne w pewnym punkcie przestrzeni. Obserwable też wiążą się z przestrzenią wektorową, ale nie są wektorami stanów. Odpowiadają wielkościom mierzalnym – przykładem może być σ_x – a przedstawiamy je jako *operatory liniowe*. John Wheeler lubił nazywać takie obiekty matematyczne *maszynami*. Wyobrażał sobie maszynę z dwoma portami: wejściem i wyjściem. Do wejścia podajemy wektor, powiedzmy $|A\rangle$. Zaczynają się wtedy poruszać tryby i maszyna dostarcza do wyjścia wynik, będący innym wektorem, powiedzmy $|B\rangle$.

Oznaczmy operator pogrubionym **M** (od słowa „maszyna”). Oto równanie, które wyraża stwierdzenie, że **M** w działaniu na wektor $|A\rangle$ daje wektor $|B\rangle$:

$$\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$$

Nie każda maszyna jest operatorem *liniowym*. Liniowość odpowiada kilku prostym własnościom. Przede wszystkim operator liniowy musi dawać jednoznacznie określony wynik dla każdego wejściowego wektora z rozważanej przestrzeni. Możemy wyobrazić

sobie maszynę, która daje wynik dla niektórych wektorów, ale dla innych zacina się i nie dostarcza nic do wyjścia. Taka maszyna nie byłaby operatorem liniowym. Kiedy tylko podamy coś do wejścia, coś musi pojawić się też na wyjściu.

Następna własność mówi, że kiedy operator liniowy **M** działa na wielokrotność wektora wejściowego, daje w wyniku identyczną wielokrotność wektora wyjściowego. Tak więc jeśli $\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$, a *z* jest dowolną liczbą zespoloną, to

$$\mathbf{M}z|A\rangle = z|B\rangle$$

Jedyna niewspomniana jeszcze zasada mówi o działaniu **M** na sumę wektorów: trzeba wtedy po prostu dodać do siebie pojedyncze wyniki:

$$\mathbf{M}\{|A\rangle + |B\rangle\} = \mathbf{M}|A\rangle + \mathbf{M}|B\rangle$$

Aby podać konkretne przedstawienie operatorów liniowych, wrócimy do wprowadzonej w wykładzie 1 reprezentacji bra i ketów jako wektorów wierszowych i kolumnowych. Odpowiednia notacja zależy od wyboru wektorów bazowych. Jeśli nasza przestrzeń wektorowa jest *N*-wymiarowa, to możemy w niej wybrać *N* ortonormalnych (ortogonalnych i znormalizowanych) wektorów ket. Oznaczmy je przez $|j\rangle$, a dualne do nich wektory bra przez $\langle j|$.

Zajmiemy się teraz równaniem

$$\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$$

i zapiszemy je przy użyciu współrzędnych. Tak jak zrobiliśmy to w równaniu 1.3, przedstawimy dowolny ket $|A\rangle$ jako sumę wielokrotności wektorów bazowych:

$$|A\rangle = \sum_j \alpha_j |j\rangle$$

W następnym kroku przedstawiamy $|B\rangle$ w podobny sposób i wstawiamy otrzymane formuły do równania $\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$. Otrzymujemy wtedy

$$\sum_j \mathbf{M}|j\rangle\alpha_j = \sum_j \beta_j |j\rangle$$

Na koniec obliczamy iloczyn skalarny obu stron z konkretnym wektorem bazowym $\langle k|$. Prowadzi to do równania

$$\sum_j \langle k|\mathbf{M}|j\rangle\alpha_j = \sum_j \beta_j \langle k|j\rangle$$

(3.1)

Aby zrozumieć, co ten wynik oznacza, przypomnijmy, że $\langle k|j\rangle$ jest równe 0, gdy *j* i *k* są różne, i 1, gdy są równe. Suma po prawej stronie redukuje się więc do pojedynczego wyrazu, β_k.

Po lewej stronie widzimy zbiór wielkości $\langle k|\mathbf{M}|j\rangle\alpha_j$. Wyrażenie $\langle k|\mathbf{M}|j\rangle$ możemy oznaczyć przez m_{kj}. Zauważ, że każde m_{kj} to po prostu liczba zespolona. Aby się o tym przekonać, pomyśl o **M** działającym na $|j\rangle$ i dającym w wyniku pewien nowy wektor ket. Iloczyn skalarny $\langle k|$ z tym nowym wektorem musi być liczbą zespoloną. Wielkości m_{kj} nazywa się *elementami macierzowymi* **M** i zwykle ustawia w kwadratową macierz *N* na *N*. Jeśli na przykład *N* = 3, możemy zapisać równanie jako

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix}$$

(3.2)

Ostatnie równanie zawiera pewne nadużycie, gdy chodzi o oznaczenia, które purystom na pewno by się nie spodobało. Po lewej stronie mamy abstrakcyjny operator liniowy, a po prawej jego konkretną reprezentację w pewnej ustalonej bazie. Przyrównywanie ich do siebie nie jest do końca precyzyjne, ale nie prowadzi do błędnych wniosków.

Wróćmy teraz do równania 3.1 i zastąpmy w nim $\langle k|\mathbf{M}|j\rangle$ wyrażeniem m_{kj}. Otrzymamy wtedy zależność

$$\sum_j m_{kj}\alpha_j = \beta_k$$

(3.3)

Tę ostatnią równość też możemy zapisać w postaci macierzowej. Równanie 3.3 wygląda w niej tak:

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{pmatrix}$$

(3.4)

Znasz pewnie regułę mnożenia macierzy, ale tak czy inaczej szybko ją przypomnimy. Aby wyznaczyć pierwszy wyraz po lewej, β_1, bierzemy pierwszy rząd macierzy i obliczamy jego „iloczyn skalarny” z kolumną α:

$$\beta_1 = m_{11}\alpha_1 + m_{12}\alpha_2 + m_{13}\alpha_3$$

W celu policzenia drugiego wyrazu obliczamy iloczyn skalarny drugiego wiersza z kolumną α:

$$\beta_2 = m_{21}\alpha_1 + m_{22}\alpha_2 + m_{23}\alpha_3$$

i tak dalej. Jeśli wcześniej nie spotkaliście się z mnożeniem macierzy, usiądźcie przy komputerze i sprawdźcie odpowiednie wzory. Będą nam od tej pory niezbędne i będziemy cały czas zakładać, że już je znacie.

Zapisywanie wektorów i operatorów liniowych w postaci konkretnych kolumn, wierszy i macierzy (łącznie nazywanych *składowymi*) ma zarówno zalety, jak i wady. Zalety są oczywiste. Składowe pozwalają nam na stosowanie pełnego zestawu reguł arytmetycznych opisujących działanie maszyny. Ich wadą jest konieczność odwoływania się do pewnego szczególnego wyboru wektorów bazowych. Fundamentalne związki między wektorami a operatorami nie zależą od tego wyboru, a konkretne przedstawienie zaciemnia ów fakt.

3.1.2 Wartości własne i wektory własne

Na ogół działanie operatora liniowego na wektor zmienia kierunek wektora. Oznacza to, że wynikiem działania maszyny nie będzie po prostu wejściowy wektor pomnożony przez jakąś liczbę. Dla konkretnego ustalonego operatora liniowego będą jednak istniały pewne wektory, w odniesieniu do których działanie operatora nie zmieni ich kierunku. Te szczególne wektory nazywamy *wektorami własnymi*. Formalna definicja wektora własnego **M** mówi, że jest to wektor $|\lambda\rangle$ spełniający równanie:

$$\mathbf{M}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

(3.5)

Trzeba przyznać, że dwukrotne użycie symbolu λ może być nieco mylące. Z jednej strony λ (w odróżnieniu od $|\lambda\rangle$) jest po prostu liczbą

– być może zespoloną, ale na pewno liczbą. Z drugiej strony $|\lambda\rangle$ to wektor ket. Co więcej, $|\lambda\rangle$ to ket związany w bardzo szczególny sposób z **M**. Kiedy wektor $|\lambda\rangle$ zostaje dostarczony do maszyny **M**, jedyne, co się dzieje, to pomnożenie go przez liczbę λ. Przyjrzyjmy się przykładowi. Jeśli **M** to macierz 2 na 2 postaci

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$

to łatwo sprawdzić, że wektor

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

zostaje po prostu pomnożony przez 3, gdy podziałamy na niego **M**. Możesz sam to sprawdzić. Maszyna **M** ma też inny wektor własny:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Kiedy **M** działa na ten wektor własny, zostaje on pomnożony przez inną liczbę, przez –1. Jeśli z kolei **M** działa na wektor

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

to *nie* zostaje on po prostu pomnożony przez liczbę. **M** zmienia zarówno jego kierunek, jak i długość.

Przez analogię do obserwacji, że wektory, które zostają w wyniku działania przez **M** po prostu pomnożone przez pewne liczby, nazywa się wektorami własnymi **M**, odpowiednie liczby nazywa się *wartościami własnymi*. W ogólnej sytuacji wartości własne to liczby

zespolone. Oto przykład, w którym sam możesz wykonać konieczne obliczenia. Rozważ macierz

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

i pokaż, że wektor

$$\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

jest jej wektorem własnym o wartości własnej *–i*.

Operatory liniowe mogą też działać na wektory bra. Oznaczenie na pomnożenie $\langle B|$ przez **M** to

$$\langle B|\mathbf{M}$$

By nie przedłużać opowieści, po prostu przedstawię teraz regułę opisującą ten rodzaj mnożenia. Najprościej wyrazić ją, używając składowych. Pamiętaj, że wektory bra przedstawiamy za pomocą składowych jako wektory wierszowe. Bra $\langle B|$ może mieć na przykład postać

$$\langle B| = \begin{pmatrix} \beta_1^* & \beta_2^* & \beta_3^* \end{pmatrix}$$

Odpowiednia reguła to znów po prostu zasada mnożenia macierzy. Nadużywszy nieco oznaczeń, otrzymujemy

$$\langle B|\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \beta_1^* & \beta_2^* & \beta_3^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix}$$

(3.6)

3.1.3 Sprzężenie hermitowskie

Być może wydaje ci się, że jeśli $\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$, to $\langle A|\mathbf{M} = \langle B|$, ale tak naprawdę jest inaczej. Problem leży w sprzężeniu zespolonym. Nawet jeśli *Z* to zwykła liczba zespolona i $Z|A\rangle = |B\rangle$, to wcale nie musi zachodzić równość $\langle A|Z = \langle B|$. Przy przejściu od wektorów ket do bra trzeba zastosować sprzężenie zespolone: $\langle A|Z^* = \langle B|$. Oczywiście jeśli *Z* to liczba rzeczywista, sprzężenie zespolone nie ma żadnego wpływu na wynik – każda liczba rzeczywista jest równa swojemu sprzężeniu zespolonemu.

Teraz potrzebujemy pojęcia odpowiadającego sprzężeniu zespolonemu dla operatorów. Przyjrzyjmy się równaniu $\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$ w notacji zawierającej składowe:

$$\sum_j m_{ji}\alpha_i = \beta_j$$

i zapiszmy jego sprzężenie zespolone,

$$\sum_j m_{ji}^* \alpha_i^* = \beta_j^*$$

Chcielibyśmy zapisać to równanie w postaci macierzowej, wykorzystując bra zamiast ketów. Musimy przy tym pamiętać, że wektory bra przedstawia się przy użyciu wierszy, nie kolumn. Aby wynik był prawidłowy, musimy też odpowiednio przedstawić sprzężenie zespolone wyrazów macierzy **M**. Uzyskaną w ten sposób macierz oznaczamy $\mathbf{M}^\dagger$, co wyjaśnimy niżej. Nowe równanie ma postać:

$$\langle A|\mathbf{M}^{\dagger} = \begin{pmatrix} \alpha_1^* & \alpha_2^* & \alpha_3^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11}^* & m_{21}^* & m_{31}^* \\ m_{12}^* & m_{22}^* & m_{32}^* \\ m_{13}^* & m_{23}^* & m_{33}^* \end{pmatrix}$$

(3.7)

Przyjrzyjmy się uważnie różnicy między macierzą pojawiającą się w tym równaniu a tą z równania 3.6. Zauważymy dwie zmiany. Najbardziej rzuca się w oczy sprzężenie zespolone każdego z wyrazów, ale powinniśmy też dostrzec różnicę w indeksach opisujących poszczególne wyrazy. Na przykład tam, gdzie w równaniu 3.6 występowało m_{23}, w równaniu 3.7 widać m_{32}^*. Inaczej mówiąc, wiersze i kolumny zostały zamienione miejscami.

Kiedy zmieniamy równanie z postaci odpowiadającej wektorom ket na tę dla wektorów bra, musimy przekształcić macierz w dwóch krokach:

1. Zamienić miejscami wiersze z kolumnami.
2. Zastosować do każdego wyrazu sprzężenie zespolone.

W notacji macierzowej zamiana wierszy z kolumnami nazywa się *transpozycją* i jest oznaczana górnym indeksem ^{T}. Macierz transponowana do macierzy **M** to

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} m_{11}^* & m_{21}^* & m_{31}^* \\ m_{12}^* & m_{22}^* & m_{32}^* \\ m_{13}^* & m_{23}^* & m_{33}^* \end{pmatrix}$$

Warto zauważyć, że transponowanie macierzy polega na przerzuceniu jej względem głównej przekątnej (przekątnej łączącej górny lewy róg z dolnym prawym). Sprzężenie zespolone macierzy transponowanej do **M** nazywa się *sprzężeniem hermitowskim* **M**

i oznacza krzyżykiem: † . Można myśleć o tym symbolu jako o połączeniu gwiazdki stosowanej na oznaczenie sprzężenia zespolonego i ^{T} używanego przy transpozycji. Formalnie zachodzi równość

$$\mathbf{M}^{\dagger} = \left[\mathbf{M}^{T}\right]^{*}$$

Podsumujmy uzyskane informacje: jeśli **M** w działaniu na ket $|A\rangle$ daje ket $|B\rangle$, to **M** † w działaniu na bra $\langle A|$ daje $\langle B|$. Symbolicznie zapisujemy to tak:
jeśli

$$\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$$

to

$$\langle A|\mathbf{M}^{\dagger} = \langle B|$$

3.1.4 Operatory hermitowskie

Liczby rzeczywiste odgrywają w fizyce szczególną rolę. Wyniki pomiarów to zawsze liczby rzeczywiste. Czasami mierzymy dwie wielkości, łączymy je ze sobą za pomocą *i* (tworząc tym samym liczbę zespoloną) i nazywamy powstałą liczbę wynikiem pomiaru, ale nawet wtedy tak naprawdę tylko zapisujemy inaczej rezultat dwóch rzeczywistych pomiarów. Gdybyśmy chcieli być wyjątkowo pedantyczni, powiedzielibyśmy, że obserwowalne wielkości są równe swoim sprzężeniom zespolonym. Oczywiście to tylko wyszukany sposób na stwierdzenie, że są one rzeczywiste. Wkrótce przekonamy się, że w mechanice kwantowej obserwable są przedstawiane za pomocą operatorów liniowych. Jakich dokładnie? Takich, jakie najlepiej odpowiadają operatorom „rzeczywistym”. Obserwable

w mechanice kwantowej przedstawia się jako operatory liniowe równe swoim sprzężeniom hermitowskim. Nazywa się je *operatorami hermitowskimi*, od nazwiska francuskiego matematyka Charles'a Hermite'a. Operatory hermitowskie spełniają warunek

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}^{\dagger}$$

W języku elementów macierzowych odpowiada to równości

$$m_{ji} = m_{ij}^{*}$$

Inaczej mówiąc, jeśli przerzucisz macierz hermitowską względem głównej przekątnej, a następnie zastosujesz sprzężenie zespolone do każdego z wyrazów, to otrzymasz tę samą macierz, od której zacząłeś. Operatory (i macierze) hermitowskie mają pewne szczególne własności. Co najważniejsze, wszystkie ich wartości własne są rzeczywiste. Udowodnijmy to.

Załóżmy, że λ i $|\lambda\rangle$ są wartością własną i odpowiadającym jej wektorem własnym operatora hermitowskiego **L**. Symbolicznie zapisujemy to tak:

$$\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

Zgodnie z definicją sprzężenia hermitowskiego mamy wtedy

$$\langle\lambda|\mathbf{L}^{\dagger} = \langle\lambda|\lambda^{*}$$

Ponieważ jednak **L** jest hermitowski, jest też równy $\mathbf{L}^{\dagger}$. Możemy więc przepisać obydwa równania jako

$$\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

(3.8)

i

$$\langle\lambda|\mathbf{L} = \langle\lambda|\lambda^*$$

(3.9)

Pomnóżmy teraz równanie 3.8 przez $\langle\lambda|$ i równanie 3.9 przez $|\lambda\rangle$. Przybierają one wtedy postać

$$\langle\lambda|\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle$$

i

$$\langle\lambda|\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle$$

Oczywiście aby obydwa równania były prawdziwe, musi zachodzić równość $\lambda = \lambda^*$. Inaczej mówiąc, λ (a więc ogólnie każda wartość własna operatora hermitowskiego) musi być liczbą rzeczywistą.

3.1.5 Operatory hermitowskie i bazy ortonormalne

Nadeszła pora na sformułowanie twierdzenia matematycznego – będę je nazywał *twierdzeniem fundamentalnym* – stanowiącego podstawę mechaniki kwantowej. Zasadnicza idea leżąca za tym twierdzeniem mówi: *w mechanice kwantowej obserwowalne wielkości przedstawia się za pomocą operatorów hermitowskich*. Jest ono dość proste, ale odgrywa bardzo ważną rolę. Precyzyjnie można je sformułować następująco:

Twierdzenie fundamentalne

• Wektory własne operatora hermitowskiego tworzą układ zupełny. Oznacza to, że **każdy wektor generowany przez taki operator** można wyrazić jako sumę wektorów własnych.

• Jeśli λ_1 i λ_2 są dwiema różnymi wartościami własnymi operatora hermitowskiego, to odpowiadające im wektory własne są do siebie prostopadłe.

• Nawet jeśli dwie wartości własne są równe, to odpowiadające im wektory własne można dobrać tak, by były do siebie prostopadłe. Sytuacja, w której dwóm istotnie różnym wektorom własnym odpowiada ta sama wartość własna, nazywa się *zdegenerowaniem*. Zdegenerowanie pojawia się na przykład wtedy, gdy dwa operatory mają wspólne wektory własne, co omówimy w rozdziale 5.1.

Twierdzenie fundamentalne można podsumować następująco: wektory własne operatora hermitowskiego tworzą bazę ortonormalną. Udowodnijmy to teraz, zaczynając od drugiego punktu.

Zgodnie z definicją wektorów i wartości własnych możemy napisać

$$\mathbf{L}|\lambda_1\rangle = \lambda_1|\lambda_1\rangle$$

$$\mathbf{L}|\lambda_2\rangle = \lambda_2|\lambda_2\rangle$$

Korzystając teraz z tego, że **L** jest hermitowski (czyli równy swojemu sprzężeniu hermitowskiemu), zamieniamy pierwsze równanie na równanie z wektorami bra:

$$\langle\lambda_1|\mathbf{L} = \lambda_1\langle\lambda_1|$$

$$\mathbf{L}|\lambda_2\rangle = \lambda_2|\lambda_2\rangle$$

Kolejny krok powinien już być dobrze widoczny, ale i tak go opiszę. Weź pierwsze równanie i oblicz iloczyn skalarny obu stron z $|\lambda_2\rangle$.

Następnie weź drugie równanie i oblicz iloczyn skalarny obu stron z $\langle\lambda_1|$. Otrzymasz wtedy:

$$\langle\lambda_1|\mathbf{L}|\lambda_2\rangle = \lambda_1\langle\lambda_1|\lambda_2\rangle$$

$$\langle\lambda_1|\mathbf{L}|\lambda_2\rangle = \lambda_2\langle\lambda_1|\lambda_2\rangle$$

Po odjęciu tych równań od siebie dostajemy

$$(\lambda_1 - \lambda_2)\langle\lambda_1|\lambda_2\rangle = 0$$

Tak więc jeśli tylko λ_1 i λ_2 są różne, to iloczyn skalarny $\langle\lambda_1|\lambda_2\rangle$ musi być równy zeru. Inaczej mówiąc, wektory własne muszą być do siebie prostopadłe.

Pokażmy teraz, że nawet jeśli $\lambda_1 = \lambda_2$, to odpowiednie wektory własne można wybrać tak, by były do siebie prostopadłe. Przypuśćmy, że

$$\mathbf{L}|\lambda_1\rangle = \lambda|\lambda_1\rangle$$

$$\mathbf{L}|\lambda_2\rangle = \lambda|\lambda_2\rangle$$

(3.10)

Inaczej mówiąc, mamy dwa istotnie różne wektory własne z tą samą wartością własną. Powinno być jasne, że dowolna kombinacja liniowa tych dwóch wektorów nadal będzie wektorem własnym odpowiadającym tej samej wartości własnej. Kiedy wiemy już, że mamy taką swobodę, nietrudno znaleźć dwie kombinacje liniowe prostopadłe do siebie.

Zobaczmy, jak to zrobić. Rozważmy dowolną kombinację liniową naszych dwóch wektorów własnych:

$$|A\rangle = \alpha|\lambda_1\rangle + \beta|\lambda_2\rangle$$

Działając na obie strony operatorem **L**, otrzymujemy

$$\mathbf{L}|A\rangle = \alpha\mathbf{L}|\lambda_1\rangle + \beta\mathbf{L}|\lambda_2\rangle$$

$$\mathbf{L}|A\rangle = \alpha\lambda|\lambda_1\rangle + \beta\lambda|\lambda_2\rangle$$

a następnie

$$\mathbf{L}|A\rangle = \lambda\left(\alpha|\lambda_1\rangle + \beta|\lambda_2\rangle\right) = \lambda|A\rangle$$

Ostatnie równanie pokazuje, że każda kombinacja liniowa $|\lambda_1\rangle$ i $|\lambda_2\rangle$ jest wektorem własnym **L** odpowiadającym tej samej wartości własnej. Zakładamy, że te dwa wektory są liniowo niezależne, inaczej nie reprezentowałyby różnych stanów. Założymy też, że razem rozpinają one przestrzeń wektorów własnych **L** o wartości własnej λ. Istnieje pewien nieskomplikowany proces, zwany *procedurą Grama–Schmidta*, pozwalający znaleźć bazę ortonormalną podprzestrzeni na podstawie znajomości jakiegoś zbioru liniowo niezależnych wektorów rozpinających tę podprzestrzeń. Mówiąc prościej, zawsze możemy znaleźć dwa ortonormalne wektory własne, zapisując je jako kombinacje liniowe $|\lambda_1\rangle$ i $|\lambda_2\rangle$. Procedurę Grama-Schmidta opiszemy niżej, w rozdziale 3.1.6.

Ostatnia część twierdzenia mówi, że zbiór wektorów własnych jest zupełny. Oznacza to, że jeśli przestrzeń jest *N*-wymiarowa, to znajdziemy w niej *N* ortonormalnych wektorów własnych. Dowód jest łatwy i pozostawiam go czytelnikom jako ćwiczenie.

***

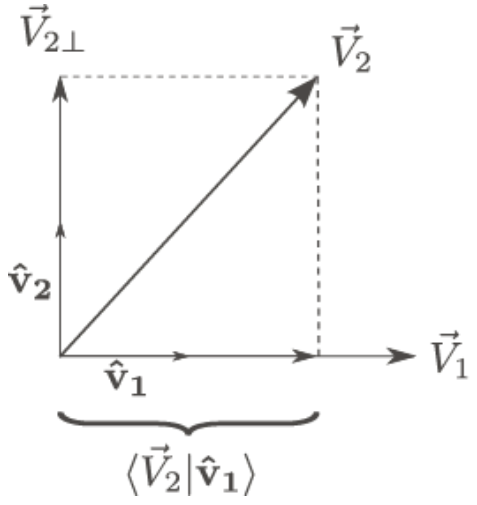
<u>Ćwiczenie 3.1. Udowodnij następujące stwierdzenie: jeśli przestrzeń wektorowa jest N-wymiarowa, to dla każdego</u>

działającego na niej operatora hermitowskiego można skonstruować bazę ortonormalną z wektorów własnych[13].

***

3.1.6 Procedura Grama–Schmidta

Czasami natrafiamy na zbiór liniowo niezależnych wektorów własnych, który *nie* jest ortonormalny. Zwykle zdarza się to, gdy układ ma stany zdegenerowane – różne stany odpowiadające tej samej wartości własnej. W takiej sytuacji zawsze możemy wykorzystać liniowo niezależne wektory, którymi dysponujemy, by utworzyć zbiór ortonormalny rozpinający tę samą przestrzeń. Odpowiednia metoda to wspomniana wcześniej procedura Grama–Schmidta. Ilustracja 3.1 przedstawia jej działanie dla prostego przykładu dwóch liniowo niezależnych wektorów. Zaczynamy od dwóch wektorów, $\vec{V}_1$ i $\vec{V}_2$, i chcemy zbudować z nich dwa wektory ortonormalne, $\hat{\mathbf{v}}_1$ i $\hat{\mathbf{v}}_2$.



$$\hat{\mathbf{v}}_1 = \frac{\vec{V}_1}{|\vec{V}_1|}$$

$$\vec{V}_{2\perp} = \vec{V}_2 - \langle \vec{V}_2 | \hat{\mathbf{v}}_1 \rangle$$

$$\hat{\mathbf{v}}_2 = \frac{\vec{V}_{2\perp}}{|\vec{V}_{2\perp}|}$$

Ilustracja 3.1: Procedura Grama–Schmidta. Jeśli dysponujemy dwoma liniowo niezależnymi wektorami, $\vec{V}_1$ i $\vec{V}_2$, które nie muszą być do siebie ortogonalne, możemy za ich pomocą skonstruować dwa wektory

ortonormalne, $\hat{\mathbf{v}}_1$ i $\hat{\mathbf{v}}_2$. Wektor $\vec{V}_{2\perp}$ odgrywa pośrednią rolę w konstrukcji. Całą procedurę można rozszerzyć do liczniejszych układów wektorów liniowo niezależnych.

W pierwszym kroku dzielimy wektor $\vec{V}_1$ przez jego długość, $|\vec{V}_1|$, otrzymując w wyniku wektor jednostkowy równoległy do $\vec{V}_1$. Oznaczmy ten wektor jednostkowy przez $\hat{\mathbf{v}}_1$ – będzie on pierwszym wektorem w naszym zbiorze ortonormalnym. W kolejnym kroku rzutujemy $\vec{V}_2$ na kierunek $\hat{\mathbf{v}}_1$, obliczając iloczyn skalarny $\langle \vec{V}_2 | \hat{\mathbf{v}}_1 \rangle$, i odejmujemy $\langle \vec{V}_2 | \hat{\mathbf{v}}_1 \rangle$ od wektora $\vec{V}_2$. Wynik odejmowania oznaczamy $\vec{V}_{2\perp}$. Ilustracja 3.1 pokazuje, że $\vec{V}_{2\perp}$ jest prostopadły do $\hat{\mathbf{v}}_1$. Na koniec dzielimy wektor $\vec{V}_{2\perp}$ przez jego długość, tworząc w ten sposób drugi element szukanego zbioru ortonormalnego, $\hat{\mathbf{v}}_2$. Powinno być jasne, że procedurę tę można rozszerzyć do liczniejszych zbiorów liniowo niezależnych wektorów leżących w przestrzeni o większej liczbie wymiarów. Jeśli na przykład mielibyśmy dodatkowo trzeci wektor $\vec{V}_3$ liniowo niezależny od poprzednich, powiedzmy zwrócony w naszym kierunku (na zewnątrz strony), odjęlibyśmy najpierw od niego jego rzutowania na każdy z wektorów jednostkowych $\hat{\mathbf{v}}_1$ i $\hat{\mathbf{v}}_2$, a następnie podzielili otrzymany wektor przez jego długość[14].

3.2 ZASADY MECHANIKI KWANTOWEJ

Jesteśmy już w pełni gotowi do sformułowania podstawowych zasad mechaniki kwantowej, zaraz więc się do tego zabierzemy. Wszystkie te reguły posługują się koncepcją obserwabli i zakładają istnienie ustalonej zespolonej przestrzeni wektorowej, której wektory reprezentują stany układu. W tym wykładzie przedstawimy cztery zasady, które nie dotyczą ewolucji wektorów stanu w czasie. W wykładzie 4 dodamy piątą zasadę opisującą właśnie zmianę stanów układu wraz z upływem czasu.

Obserwablę można by również nazwać wielkością mierzalną. To każda wielkość, którą potencjalnie potrafimy zmierzyć przy użyciu

odpowiedniego instrumentu. Wcześniej mówiliśmy o mierzeniu składowych spinu, σ_x, σ_y i σ_z. To właśnie przykłady obserwabli. Jeszcze do nich wrócimy, ale najpierw przyjrzyjmy się ogólnym zasadom:

- Zasada 1: Obserwable czy też wielkości mierzalne w mechanice kwantowej przedstawia się jako operatory liniowe **L.**

Zdaję sobie sprawę, że tego typu beznadziejnie abstrakcyjne stwierdzenia stanowią zasadniczy powód, dla którego ludzie rezygnują z zajmowania się mechaniką kwantową i przerzucają się na surfing. Nie przejmuj się – znaczenie tych słów stanie się jasne przed końcem wykładu. Przekonamy się też wkrótce, że **L** musi być hermitowski. Niektórzy autorzy traktują to jako dodatkowy postulat czy fundamentalną regułę. My zdecydowaliśmy się na wyprowadzenie tego faktu z pozostałych zasad. Ostateczny wynik jest tak czy inaczej identyczny: operatory reprezentujące obserwable są hermitowskie.

- Zasada 2: Możliwe wyniki pomiaru to wartości własne operatora reprezentującego rozważaną obserwablę. Będziemy je oznaczać przez λ_i. Stan, dla którego wynik pomiaru wynosi jednoznacznie λ_i, to odpowiadający λ_i wektor własny $|\lambda_i\rangle$. Nie szykuj jeszcze deski surfingowej.

Można to też wypowiedzieć inaczej: jeśli układ znajduje się w stanie własnym $|\lambda_i\rangle$, to w wyniku pomiaru musimy otrzymać λ_i.

- Zasada 3: Stany rozróżnialne są reprezentowane przez wektory prostopadłe do siebie.
- Zasada 4: Jeśli $|A\rangle$ jest wektorem stanu badanego układu i mierzymy obserwablę **L**, to prawdopodobieństwo zaobserwowania wartości λ_i jest równe

$$P(\lambda_i) = \langle A|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|A\rangle$$

(3.11)

Przypomnę tu, że λ_i to wartości własne **L**, a $|\lambda_i\rangle$ to odpowiadające im wektory własne.

Te krótkie stwierdzenia niewątpliwie wymagają dalszych wyjaśnień, które wkrótce podamy. Na razie zgódźmy się zaakceptować pierwsze zdanie, czyli założenie, że każdą obserwablę można utożsamić z operatorem liniowym. Zaczynamy już rozumieć, że operator może nam posłużyć jako sposób zebrania stanów wraz z odpowiednimi wartościami własnymi, stanowiącymi możliwe wyniki pomiarów wykonanych na tych stanach. Ta idea stanie się jaśniejsza w dalszej części książki. Przypomnijmy pewne ważne punkty naszego wcześniejszego omówienia spinów. Przede wszystkim wynik pomiaru jest w ogólnej sytuacji obciążony statystyczną niepewnością. Niemniej jednak dla dowolnej ustalonej obserwabli istnieją stany, dla których wynik pomiaru jest całkowicie pewny. Jeśli na przykład instrument A mierzący spiny zostanie ustawiony wzdłuż osi *z*, to stan $|g\rangle$ zawsze da wynik $\sigma_z = +1$. Podobnie stan $|d\rangle$ nigdy nie pokaże wyniku innego niż $\sigma_z = -1$. Zasada 1 pozwala nam na inne spojrzenie na te fakty. Wynika z niej, że każdą z rozważanych obserwabli (σ_x, σ_y i σ_z) można utożsamić z konkretnym operatorem liniowym działającym na dwuwymiarowej przestrzeni stanów opisujących spin.

Kiedy mierzymy daną obserwablę, wynik jest zawsze liczbą rzeczywistą należącą do pewnego ustalonego zbioru możliwych rezultatów. Jeśli na przykład mierzymy energię atomu, to otrzymamy jeden spośród z góry ustalonych poziomów energetycznych atomu. W dobrze już nam znanym przykładzie spinu możliwe wyniki dla każdej ze składowych to ±1. Instrument nigdy nie pokazuje innego wyniku. Zasada 2 określa związek między operatorem reprezentującym daną obserwablę a możliwymi liczbowymi wynikami pomiaru. Mówi ona, że rezultat pomiaru jest zawsze jedną z wartości własnych odpowiedniego operatora. Tak więc każda ze składowych operatora spinu musi mieć dwie wartości własne równe ±1[15].

Zasada 3 jest najciekawsza, przynajmniej moim zdaniem. Dotyczy ona *stanów rozróżnialnych*, kluczowego pojęcia, na które się już natknęliśmy. Dwa stany są fizycznie różne, jeśli istnieje eksperyment,

który pozwala je jednoznacznie rozróżnić. Na przykład stany $|g\rangle$ i $|d\rangle$ można rozróżnić, mierząc σ_z. Jeśli ktoś dostarczy ci spin i powie, że znajduje się on albo w stanie $|g\rangle$, albo w stanie $|d\rangle$, to aby się przekonać, która odpowiedź jest prawdziwa, wystarczy, byś ustawił A wzdłuż osi *z* i zmierzył σ_z. Nie możesz się pomylić. Tak samo jest dla $|l\rangle$ i $|p\rangle$. Możesz je rozróżnić, mierząc σ_x.

Przypuśćmy jednak, że powiedziano ci, iż spin znajduje się w jednym z dwóch stanów $|g\rangle$ lub $|p\rangle$ (góra lub prawo). Nie istnieje żaden pomiar, który pozwoliłby ci jednoznacznie stwierdzić, która z tych możliwości faktycznie zachodzi. Pomiar σ_z nic tu nie pomoże. Jeśli otrzymałbyś wynik $\sigma_z = +1$, początkowym stanem wciąż mógłby być stan $|p\rangle$, gdyż w tym wypadku mielibyśmy 50 procent możliwości otrzymania właśnie takiego wyniku. Z tego powodu stany $|g\rangle$ i $|d\rangle$ nazywa się fizycznie rozróżnialnymi, czego nie da się powiedzieć o stanach $|g\rangle$ i $|p\rangle$. Można stwierdzić, że iloczyn skalarny dwóch wektorów stanu stanowi miarę naszej niezdolności do ich odróżnienia. Czasami ten iloczyn skalarny nazywa się *nakładaniem się* czy *nałożeniem*. Zasada 3 wymaga, by fizycznie różne stany przedstawiały wektory prostopadłe do siebie, czyli o zerowym nakładaniu się. Dla stanów spinowych mamy więc $\langle g|d\rangle = 0$, ale $\langle g|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Wreszcie zasada 4 podaje ilościowe sformułowanie tych koncepcji w postaci reguły wyrażającej prawdopodobieństwa otrzymania w eksperymencie konkretnych wyników. Jeśli założymy, że układ został przygotowany w stanie $|A\rangle$, a następnie dokonano pomiaru obserwabli **L**, to uzyskany wynik będzie jedną z wartości własnych λ_i operatora **L**. Ogólnie nie da się jednak stwierdzić ze stuprocentową pewnością, która z tych wartości zostanie zaobserwowana. Znamy wyłącznie prawdopodobieństwo – nazwijmy je $P(\lambda_i)$ – otrzymania wyniku λ_i. Zasada 4 mówi nam, jak obliczyć to prawdopodobieństwo, wyrażając je w zależności od nałożenia się $|A\rangle$ i $|\lambda_i\rangle$. Ściśle rzecz ujmując, prawdopodobieństwo jest równe kwadratowi wielkości nałożenia się $|A\rangle$ i $|\lambda_i\rangle$:

$$P(\lambda_i) = \left|\langle A|\lambda_i\rangle\right|^2$$

czy też równoważnie

$$P(\lambda_i) = \langle A|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|A\rangle$$

Zastanawiasz się może, czemu prawdopodobieństwo nie jest równe po prostu nałożeniu się. Skąd wziął się kwadrat? Pamiętaj, że iloczyn skalarny dwóch wektorów nie zawsze jest dodatni, nie musi nawet być liczbą rzeczywistą. Prawdopodobieństwa muszą zaś być rzeczywiste i dodatnie. Utożsamienie $P(\lambda_i)$ z $\langle A|\lambda_i\rangle$ nie miałoby zatem sensu. Z kolei kwadrat długości liczby zespolonej, $\langle A|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|A\rangle$, jest zawsze rzeczywisty i dodatni, a więc może odgrywać rolę prawdopodobieństwa otrzymania danego wyniku.

Podane wyżej zasady mają następującą ważną konsekwencję:

Operatory reprezentujące obserwable są hermitowskie.

Wynika to z dwóch faktów. Po pierwsze, ponieważ wynik każdego eksperymentu musi być liczbą rzeczywistą, wartości własne operatora **L** też muszą być rzeczywiste. Po drugie, wektory własne reprezentujące stany rozróżnialne muszą mieć różne wartości własne, a co więcej, muszą być ortogonalne. Te warunki wystarczają już do wykazania, że **L** jest hermitowski.

3.3 PRZYKŁAD: OPERATORY SPINU

Być może trudno w to uwierzyć, ale pojedyncze spiny – choć są tak prostymi układami – wciąż mogą nas wiele nauczyć o mechanice kwantowej. Mamy to zamiar w pełni wykorzystać. Naszym celem w tym podrozdziale będzie zapisanie operatorów spinu w konkretnej

postaci, jako macierzy 2 na 2. Potem przekonamy się, jak działają w pewnych ściśle określonych sytuacjach. Zanim jednak zajmiemy się szczegółami konstrukcji operatorów spinu i odpowiednich wektorów stanu, opowiemy trochę dokładniej o związkach operatorów z pomiarami fizycznymi. Ta relacja ma dość skomplikowany charakter i będziemy do niej wracać jeszcze kilkakrotnie.

Jak wiesz, fizycy rozróżniają odrębne rodzaje wielkości fizycznych, w szczególności skalary i wektory. Nie powinno cię więc dziwić, że operator związany z pomiarem wektora (na przykład spinu) sam ma pewne własności wektorowe.

W naszej podróży spotkaliśmy już różne rodzaje wektorów. Najprostsze z nich, w pewnym sensie prototypowe, to 3-wektory. Są one matematycznymi reprezentacjami strzałek w trójwymiarowej przestrzeni i często zapisuje się je jako trzy liczby rzeczywiste ustawione w kolumnową macierz. Ponieważ ich składowe mają wartości rzeczywiste, 3-wektory nie wystarczyłyby nam do przedstawienia stanów kwantowych. Do tego potrzebujemy bra i ketów, których składowe to liczby zespolone.

Jakiego rodzaju wektorem jest operator spinu σ? Z pewnością nie jest wektorem stanu (ani bra, ani ket). Nie jest też do końca zwykłym 3-wektorem, ale w pewnym sensie bardzo go przypomina, gdyż wiąże się z wyborem kierunku w przestrzeni. W praktyce często będziemy traktować σ jak zwykły 3-wektor, ale jednocześnie, by nie powodować nieporozumień, nazywać go *operatorem 3-wektorowym.*

Co to tak naprawdę znaczy? Jeśli chodzi o interpretację fizyczną, wygląda ona następująco: tak jak instrument mierzący spiny może tylko odpowiadać na pytania dotyczące orientacji spinu względem ustalonego kierunku, podobnie operator spinu może wyłącznie dostarczać informacji o składowej spinu odpowiadającej ustalonemu kierunkowi. Aby fizycznie zmierzyć spin w innym kierunku, musimy obrócić instrument pomiarowy. Podobnie jest z operatorem spinu – jeśli chcemy, by powiedział nam coś o składowej spinu w innym kierunku, to też musimy go „obrócić”. Tym razem „obrót” to pewna operacja matematyczna. Zasadniczo chodzi o to, że dla każdego

kierunku, w którym można ustawić instrument pomiarowy, istnieje odpowiadający mu operator spinu.

3.4 KONSTRUKCJA OPERATORÓW SPINU

Zajmijmy się teraz szczegółowo operatorami spinu. Naszym początkowym celem będzie konstrukcja operatorów reprezentujących bazowe składowe spinu, σ_x, σ_y i σ_z. Następnie wykorzystamy otrzymane wyniki do konstrukcji operatora reprezentującego składową spinu związaną z dowolnym kierunkiem. Jak zwykle zaczniemy od σ_z. Wiemy, że σz ma dobrze określone, jednoznaczne wartości dla stanów $|g\rangle$ i $|d\rangle$ oraz że odpowiednie wartości pomiarów to $\sigma_z = +1$ i $\sigma_z = -1$. Trzy pierwsze fundamentalne zasady mówią nam więc, co następuje:

- Zasada 1: Każda składowa σ jest reprezentowana przez operator liniowy.
- Zasada 2: Wektory własne σz to $|g\rangle$ i $|d\rangle$. Odpowiednie wartości własne to +1 i −1. Możemy to wyrazić za pomocą abstrakcyjnych równań:

$$\sigma_z|g\rangle = |g\rangle$$

$$\sigma_z|d\rangle = -|d\rangle$$

(3.12)

- Zasada 3: Stany $|g\rangle$ i $|d\rangle$są do siebie ortogonalne. Można to wyrazić równaniem

$$\langle g|d\rangle = 0$$

(3.13)

Przypomnijmy nasze kolumnowe przedstawienie stanów $|g\rangle$ i $|d\rangle$ z równań 2.11 i 2.12. Przy jego użyciu możemy zapisać równania 3.12 w postaci macierzowej jako

$$\begin{pmatrix} (\sigma_z)_{11} & (\sigma_z)_{12} \\ (\sigma_z)_{21} & (\sigma_z)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(3.14)

i

$$\begin{pmatrix} (\sigma_z)_{11} & (\sigma_z)_{12} \\ (\sigma_z)_{21} & (\sigma_z)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(3.15)

Istnieje tylko jedna macierz, która spełnia te równania. Zostawiam ci jako ćwiczenie dowód faktu, że musi zachodzić równość

$$\begin{pmatrix} (\sigma_z)_{11} & (\sigma_z)_{12} \\ (\sigma_z)_{21} & (\sigma_z)_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(3.16)

którą można zwięźlej zapisać jako

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(3.17)

***

Ćwiczenie 3.2. Udowodnij, że równanie 3.16 opisuje jedyne rozwiązanie równań 3.14 i 3.15.

***

To nasz pierwszy przykład operatora kwantowomechanicznego. Podsumujmy informacje, które wykorzystaliśmy do jego skonstruowania. Po pierwsze, potrzebowaliśmy pewnych danych eksperymentalnych: istnieją mianowicie stany, które nazwaliśmy $|g\rangle$ i $|d\rangle$, dla których pomiar σ_z daje jednoznaczne wyniki ±1. W kolejnym kroku zasady mechaniki kwantowej pozwoliły nam stwierdzić, że wektory $|g\rangle$ i $|d\rangle$ są do siebie ortogonalne i są wektorami własnymi operatora liniowego σ_z. Te same zasady powiedziały nam wreszcie, że odpowiednie wartości własne to zaobserwowane (czy też zmierzone) wartości, czyli właśnie ±1. To wystarczyło już do wyprowadzenia równania 3.17.

Czy możemy zrobić to samo dla dwu pozostałych bazowych składowych spinu, σ_x i σ_y? Tak, możemy[16]. Wektorami własnymi σ_x są $|p\rangle$ i $|l\rangle$, o wartościach własnych równych odpowiednio +1 i –1. Zapis tego faktu w postaci równań to

$$\sigma_x|p\rangle = |p\rangle$$

$$\sigma_x|l\rangle = -|l\rangle$$

(3.18)

Przypomnijmy, że wektory $|p\rangle$ i $|l\rangle$ są kombinacjami liniowymi $|g\rangle$ i $|d\rangle$:

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

(3.19)

Podstawiwszy za $|g\rangle$ i $|d\rangle$ odpowiednie wektory kolumnowe, otrzymujemy

$$|p\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$|l\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Aby równania 3.18 przyjęły bardziej konkretną postać, zapisujemy je w formie macierzowej:

$$\begin{pmatrix} (\sigma_x)_{11} & (\sigma_x)_{12} \\ (\sigma_x)_{21} & (\sigma_x)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

i

$$\begin{pmatrix} (\sigma_x)_{11} & (\sigma_x)_{12} \\ (\sigma_x)_{21} & (\sigma_x)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Jeśli rozpisze się odpowiednie wyrażenia, otrzyma się cztery proste do rozwiązania równania opisujące poszczególne wyrazy macierzy, $(\sigma_x)_{11}$, $(\sigma_x)_{12}$, $(\sigma_x)_{21}$ i $(\sigma_x)_{22}$. Oto ostateczne wyniki:

$$\begin{pmatrix} (\sigma_x)_{11} & (\sigma_x)_{12} \\ (\sigma_x)_{21} & (\sigma_x)_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

czyli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Na koniec możemy zrobić to samo z σ_y. Wektory własne σ_x to stany *wewnątrz* i *zewnątrz*, $|w\rangle$ i $|z\rangle$:

$$|w\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

$$|z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

W składowych powyższe równania wyglądają następująco:

$$|w\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$|z\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Łatwe rachunki prowadzą do wyniku:

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Podsumowując, przekonaliśmy się, że trzy operatory σ_x, σ_y i σ_z są reprezentowane przez trzy macierze

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

(3.20)

Uzyskaliśmy trzy słynne macierze. Noszą one nazwę pochodzącą od nazwiska ich odkrywcy: to *macierze Pauliego*[17].

3.5 CZĘSTO SPOTYKANA POMYŁKA

Nadeszła pora, by ostrzec cię o potencjalnej pułapce. Odpowiedniość między operatorami a pomiarami odgrywa w mechanice kwantowej fundamentalną rolę. Bardzo łatwo ją jednak źle zrozumieć. O operatorach w mechanice kwantowej wiemy następujące rzeczy:

1. Operatory to obiekty, przy użyciu których obliczamy wartości i wektory własne.

2. Operatory działają na wektory stanu (będące abstrakcyjnymi obiektami matematycznymi), nie na realistyczne układy fizyczne.
3. Kiedy operator działa na wektor stanu, daje w wyniku inny wektor stanu.

Kiedy już wymieniliśmy podstawowe fakty dotyczące operatorów, powinniśmy też ostrzec cię o często spotykanym błędzie. Czasami myśli się, że pomiar obserwabli nie różni się niczym od zadziałania odpowiadającym jej operatorem na rozważany stan. Przypuśćmy na przykład, że jesteśmy zainteresowani pomiarem obserwabli **L**. Pomiar to pewna operacja wykonana przez instrument pomiarowy na układzie, ale na pewno nie jest ona tym samym co działanie na rozważany stan operatorem **L**. Jeśli stan układu przed wykonaniem pomiaru to $|A\rangle$, nie byłoby poprawne stwierdzenie, że pomiar **L** spowoduje zmianę stanu na $\mathbf{L}|A\rangle$.

Aby zrozumieć, o co chodzi, przyjrzymy się konkretnemu przykładowi. Na szczęście wystarczą nam do tego rozważane w poprzednim podrozdziale spiny. Przypomnijmy równanie 3.12:

$$\sigma_z|g\rangle = |g\rangle$$

$$\sigma_z|d\rangle = -|d\rangle$$

W tej sytuacji nie ma mowy o pułapce, gdyż zarówno $|g\rangle$, jak i $|d\rangle$ są wektorami własnymi σ_z. Jeśli układ został przygotowany, powiedzmy w stanie $|d\rangle$, to pomiar ze stuprocentową pewnością da wynik –1, a operator σ_z przekształci przygotowany stan w odpowiedni stan po pomiarze, $-|d\rangle$. Stan $-|d\rangle$ różni się od stanu $|d\rangle$ wyłącznie stałą, przez którą został pomnożony, a więc z fizycznego punktu widzenia są one identyczne. Nie widać żadnych problemów.

Przyjrzyjmy się jednak teraz działaniu σ_z na przygotowany uprzednio stan $|p\rangle$, który *nie* jest jednym z wektorów własnych. Z równania 3.19 wynika, że

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

Działanie na ten wektor stanu operatorem σ_z daje

$$\sigma_z|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_z|g\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_z|d\rangle$$

czyli

$$\sigma_z|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

(3.21)

Cóż, dotarliśmy do miejsca, gdzie leży pułapka. Nawet jeśli wydaje ci się inaczej, wektor stanu widniejący po prawej stronie równania 3.21 z pewnością *nie* jest stanem, który może się pojawić w konsekwencji pomiaru σ_z. Taki pomiar mógłby dać albo wynik +1, pozostawiając układ w stanie $|g\rangle$, albo –1, pozostawiając go w stanie $|d\rangle$. Żadna z tych możliwości nie doprowadziłaby do znalezienia się wektora stanu układu w superpozycji opisanej równaniem 3.21.

Jednak ten wektor stanu przecież musi mieć *coś* wspólnego z wynikiem pomiaru? Faktycznie tak jest. Częściową odpowiedź na tę zagadkę znajdziemy w wykładzie 4, w którym dowiemy się, jak nowy wektor stanu pozwala nam obliczać prawdopodobieństwa dla każdego możliwego wyniku pomiaru. Nawet wtedy jednak musimy pamiętać, że wyniku pomiaru nie da się poprawnie opisać, nie biorąc pod uwagę instrumentu pomiarowego jako części układu. To, co w rzeczywistości dzieje się podczas pomiaru, będzie tematem rozdziału 7.8.

3.6 JESZCZE RAZ O OPERATORACH 3-WEKTOROWYCH

Wróćmy teraz do omówienia koncepcji operatorów 3-wektorowych. Składowe spinu odpowiadające kolejnym osiom oznaczyłem przez σ_x, σ_y i σ_z, sugerując tym samym, że są one składowymi jakiegoś 3-wektora. To dobry moment na powrót do dwóch różnych pojęć wektora, które niemal bezustannie pojawiają się w fizyce. Po pierwsze, może chodzić o zwykły, prozaiczny wektor w trójwymiarowej przestrzeni, który zdecydowaliśmy się nazywać 3-wektorem. Jak się już przekonaliśmy, 3-wektory mają składowe odpowiadające każdemu z trzech bazowych kierunków w przestrzeni.

Po drugie, całkowicie odmienne znaczenie pojęcia *wektor* odpowiada wektorom stanów układu. Tak więc $|g\rangle$ i $|d\rangle$, $|p\rangle$ i $|l\rangle$, $|w\rangle$ i $|z\rangle$ to wektory stanu w dwuwymiarowej przestrzeni stanów pojedynczego spinu. Co wobec tego można powiedzieć o σ_x, σ_y i σ_z? Czy są wektorami, a jeśli tak, to jakiego typu?

Rzecz jasna, nie są to wektory stanu: są operatorami (zapisanymi w postaci macierzowej) odpowiadającymi trzem mierzalnym składowym spinu. Tak naprawdę te operatory 3-wektorowe można traktować jako nowy rodzaj wektorów. Różnią się zarówno od wektorów stanu, jak i od zwykłych 3-wektorów. Równocześnie jednak, ponieważ operatory spinu zachowują się bardzo podobnie do 3-wektorów, myślenie o nich w ten sposób nie prowadzi do błędów i od tej pory będziemy tak właśnie robić.

Składowe spinu mierzymy, ustawiając instrument A wzdłuż jednej z trzech osi, a następnie go uruchamiając. Dlaczego wobec tego nie ustawić A w dowolnym kierunku i nie zmierzyć składowej σ odpowiadającej właśnie temu kierunkowi? Innymi słowy, czemu nie wziąć dowolnego 3-wektora jednostkowego $\hat{n}$ o składowych n_x, n_y oraz n_z, nie ustawić instrumentu A tak, by jego strzałka wskazywała kierunek $\hat{n}$, a następnie nie uruchomić A i nie zmierzyć składowej σ wzdłuż osi $\hat{n}$? Musi istnieć jakiś operator odpowiadający tej mierzalnej wielkości.

Jeśli σ naprawdę zachowuje się jak 3-wektor, to składowa σ wzdłuż osi $\hat{n}$ powinna być po prostu zwykłym iloczynem skalarnym σ[18] i $\hat{n}$ [19]. Oznaczmy tę składową σ przez σ_n:

$$\sigma_n = \vec{\sigma} \cdot \vec{n}$$

albo, jeśli rozpiszemy ostatnie wyrażenie,

$$\sigma_n = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z$$

(3.22)

Aby wyjaśnić, co właściwie oznacza ostatnie równanie, wystarczy przypomnieć, że składowe wektora $\hat{n}$ to zwykłe liczby, a nie operatory. Równanie 3.22 opisuje operator wektorowy powstały jako suma trzech wyrazów, zawierających odpowiednio czynniki liczbowe n_x, n_y i n_z. Ściśle rzecz ujmując, możemy zapisać równanie 3.22 w postaci macierzowej:

$$\sigma_n = n_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + n_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + n_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Jeszcze czytelniejsze będzie połączenie trzech wyrażeń w pojedynczą macierz:

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & n_z \end{pmatrix}$$

(3.23)

Do czego się nam to może przydać? Na razie wygląda na bezużyteczne, ale zmieni się to, kiedy obliczymy już wektory

i wartości własne $\sigma_{\hat{n}}$. Poznamy wtedy możliwe wyniki pomiaru w kierunku $\hat{n}$, a co więcej, będziemy też umieli obliczyć prawdopodobieństwa otrzymania tych wyników. Inaczej mówiąc, poznamy pełny obraz pomiarów spinu w trójwymiarowej przestrzeni. A to już, przynajmniej moim zdaniem, niezła sztuczka.

3.7 ZBIERANIE NAUKOWYCH OWOCÓW

Teraz jesteśmy gotowi do wykonania prawdziwych obliczeń, które powinny sprawić, że fizyk w twoim sercu podskoczy w górę z radości. Zajmijmy się najpierw szczególnym przypadkiem, w którym wektor $\hat{n}$ leży w płaszczyźnie *x*–*z*, czyli płaszczyźnie odpowiadającej stronie, którą czytasz. Ponieważ $\hat{n}$ to wektor jednostkowy, możemy napisać

$$n_z = \cos\theta$$

$$n_x = \sin\theta$$

$$n_y = 0$$

gdzie Θ to kąt między osiami *z* i $\hat{n}$. Wstawiwszy te wartości do równania 3.23, dostajemy

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

Ćwiczenie 3.3. Oblicz wektory i wartości własne $\sigma_{\hat{n}}$. Podpowiedź: załóż, że wektor λ_1 ma postać

$$\begin{pmatrix} \cos\alpha \\ \sin\alpha \end{pmatrix}$$

gdzie α to pewien nieznany parametr. Wstaw ten wektor do równania na wartość własną i rozwiąż je, szukając α w zależności od θ. Dlaczego mogliśmy użyć tylko pojedynczego parametru α? Zauważ, że zaproponowany przez nas wektor kolumnowy ma długość 1.

***

Oto ostateczne wyniki:

$$\lambda_1 = 1$$

$$|\lambda_1\rangle = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

i

$$\lambda_2 = -1$$

$$|\lambda_2\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\dfrac{\theta}{2} \\ \cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

Zwróć uwagę na kilka istotnych faktów. Po pierwsze, wartości własne są znów równe +1 i –1. To nie powinno nas zaskoczyć: instrument A daje tylko jeden z tych dwóch wyników, niezależnie od tego, jak jest skierowany. Zawsze jednak miło jest zobaczyć

wyprowadzenie tego rezultatu przy użyciu równań. Po drugie, dwa wektory własne są do siebie ortogonalne.

Przyszła pora na konkretne przewidywania dotyczące wyników eksperymentu. Załóżmy, że A jest początkowo ustawiony wzdłuż osi *z*, a spin został przygotowany w „górnym" stanie $|g\rangle$. Następnie obracamy A tak, by leżał wzdłuż osi $\hat{n}$. Jakie jest prawdopodobieństwo otrzymania wyniku σ_n = +1? Korzystając z zasady 4, a także z konkretnych wierszowych i kolumnowych rozwinięć $\langle g|$ oraz $|\lambda_1\rangle$, otrzymujemy odpowiedź

$$P(+1) = |\langle g|\lambda_1\rangle|^2 = \cos^2\frac{\theta}{2}$$

(3.24)

W podobny sposób uzyskujemy odpowiedź

$$P(-1) = |\langle g|\lambda_2\rangle|^2 = \sin^2\frac{\theta}{2}$$

(3.25)

Ostatnie wzory pozwalają nam stwierdzić, że opowieść o spinach zatoczyła prawie pełne koło. Kiedy wprowadzaliśmy spiny, zadeklarowaliśmy, że jeśli przygotujemy ich dużą liczbę w stanie „górnym", a następnie zmierzymy ich składową w kierunku $\hat{n}$ leżącym pod kątem θ do osi *z*, to średnia wartość zmierzonych wyników wyniesie cos θ, czyli tyle samo, ile otrzymalibyśmy dla zwykłego 3-wektora w fizyce klasycznej. Czy nasze rachunki matematyczne prowadzą do tego samego wniosku? Spróbowałyby tylko czegoś innego! Jeśli teoria nie zgadza się z wynikami eksperymentu, to właśnie ją trzeba odrzucić. Zobaczmy, czy nasza teoria na razie radzi sobie ze stawianymi jej problemami.

Niestety, musimy nieco oszukać, używając równania, które zostanie dokładnie wyjaśnione dopiero w następnym wykładzie. Równanie to

mówi nam, jak obliczać wartość średnią (zwaną też wartością oczekiwaną) otrzymanych w pomiarze wyników.

Oto i ono:

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_i \lambda_i P(\lambda_i)$$

(3.26)

Warto wspomnieć, że równanie 3.26 to standardowy wzór na wartość średnią, a jego zastosowanie nie ogranicza się do mechaniki kwantowej. Aby obliczyć wartość oczekiwaną pomiaru odpowiadającego operatorowi **L**, mnożymy każdą z wartości własnych przez związane z nią prawdopodobieństwo, a następnie dodajemy do siebie otrzymane liczby. Oczywiście operator, który nas teraz interesuje, to σ_n, a wszystkie potrzebne wartości już poznaliśmy. Wystarczy wstawić je do ostatniego wzoru. Dzięki skorzystaniu z równań 3.24 i 3.25 oraz znajomości wartości własnych dostajemy

$$\langle \sigma_n \rangle = (+1)\cos^2\frac{\theta}{2} + (-1)\sin^2\frac{\theta}{2}$$

czyli

$$\langle \sigma_n \rangle = \cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}$$

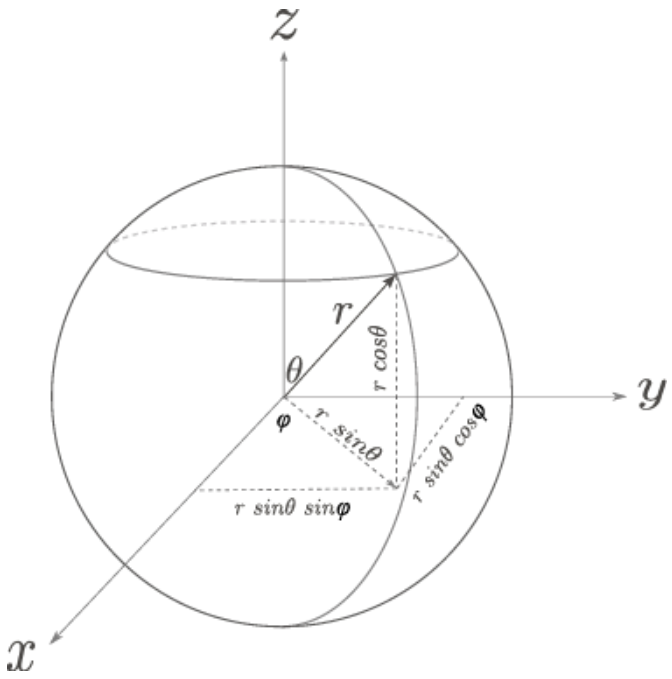
Jeśli pamiętasz podstawy trygonometrii, to wiesz, że ostatnia równość daje $\langle \sigma_n \rangle = \cos\theta$, co idealnie zgadza się z eksperymentem. Tak! Udało się nam! Skoro dotarliśmy już tak daleko, może zechcesz zmierzyć się z nieco ogólniejszym problemem. Tak jak przedtem, zaczynamy od instrumentu A ustawionego wzdłuż osi *z*. Tym razem jednak po uprzednim przygotowaniu spinu w stanie „górnym” obracamy A w dowolnym kierunku w przestrzeni, by wykonać drugi

zestaw pomiarów. W takim wypadku $n_y \neq 0$. Zabierz się śmiało do obliczeń.

***

<u>Ćwiczenie 3.4. Zapiszmy następujące równości: n_z = cosθ, n_x = sinθ cosφ i n_y = sinθ sinφ. Kąty θ i φ definiujemy zgodnie ze standardową umową dotyczącą współrzędnych sferycznych (zob. ilustracja 3.2). Oblicz wartości i wektory własne dla macierzy z równania 3.23.</u>

***



Ilustracja 3.2. Współrzędne sferyczne. Powyższy diagram ilustruje tradycyjne oznaczenia współrzędnych sferycznych: r, Θ i φ. Przedstawia on też odpowiednią transformację do współrzędnych kartezjańskich: x = r sinΘ cosφ, y = r sinΘ sinφ i z = r cosΘ.

Możesz też spróbować swoich sił w dużo bardziej skomplikowanym przykładzie, w którym mamy do czynienia z dwoma kierunkami, $\hat{n}$ i $\hat{m}$

. W takiej sytuacji instrument A nie tylko ostatecznie ląduje w ustawieniu odpowiadającym dowolnemu kierunkowi, ale też początkowo jest ustawiony w (innym) dowolnym kierunku.

***

Ćwiczenie 3.5. Przypuśćmy, że spin został przygotowany tak, że $\sigma_{\hat{m}} = +1$, a następnie instrument obrócono w kierunku $\hat{n}$ i zmierzono $\sigma_{\hat{n}}$. Jakie jest prawdopodobieństwo, że uzyskany wynik to +1? Używamy tu oznaczenia $\sigma_{\hat{m}} = \sigma \cdot \hat{m}$, tak samo jak było to w odniesieniu do $\sigma_{\hat{n}}$.

***

Poprawna odpowiedź to kwadrat cosinusa połowy kąta między $\hat{n}$ a $\hat{m}$. Czy umiesz ją wyprowadzić?

3.3 REGUŁA POLARYZACJI SPINU

Możesz teraz spróbować udowodnić pewne ważne twierdzenie. Nazwę je następująco:

Reguła polaryzacji spinu: *Każdy stan pojedynczego spinu jest wektorem własnym pewnej składowej operatora spinu.*

Inaczej mówiąc, jeśli mamy dany dowolny stan

$$|A\rangle = \alpha_g |g\rangle + \alpha_d |d\rangle$$

to umiemy znaleźć kierunek $\hat{n}$ taki, by

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{n}\,|A\rangle = |A\rangle$$

Oznacza to, że dla dowolnego stanu spinu istnieje pewne ustawienie instrumentu A takie, że A zarejestruje w nim przy każdym pomiarze wynik +1. W języku fizyki mówimy, że stany spinu można scharakteryzować przy użycia *wektora polaryzacji*, wzdłuż którego składowa spinu jest z pewnością równa +1, zakładając oczywiście, że znamy odpowiedni wektor stanu.

Ciekawą konsekwencją tego twierdzenia jest fakt, że nie istnieje stan, dla którego *wartości oczekiwane* każdej z trzech bazowych składowych spinu są równe 0. Można to wyrazić ilościowo: rozważmy w tym celu wartość oczekiwaną spinu w kierunku $\hat{n}$. Ponieważ $|A\rangle$ jest wektorem własnym $\vec{\sigma}\cdot\vec{n}$ (o wartości własnej +1), badaną wartość oczekiwaną można wyrazić jako

$$\langle\vec{\sigma}\cdot\vec{n}\rangle = 1$$

Z kolei wartości oczekiwane prostopadłych składowych σ w stanie $|A\rangle$ są równe zeru. Wynika z tego, że suma kwadratów wartości oczekiwanych wszystkich trzech głównych składowych σ wynosi 1. Co więcej, jest to prawda dla każdego stanu:

$$\langle\sigma_x\rangle^2 + \langle\sigma_y\rangle^2 + \langle\sigma_z\rangle^2 = 1$$

(3.27)

Pamiętaj o tym fakcie. Wrócimy do niego w wykładzie 6.

13 Dowód podanego stwierdzenia wymaga jednego nietrywialnego faktu – wiedzy, że każdy operator hermitowski ma jakiś wektor własny. Wynika to z zasadniczego twierdzenia algebry (przyp. tłum.).

14 W tym wypadku określenie „na zewnątrz strony" nie oznacza, że wektor $\vec{v}_3$ musi być prostopadły do płaszczyzny wyznaczonej przez stronę. Możliwość rozpoczęcia

od wektorów, które nie są do siebie prostopadłe, to kluczowy aspekt procedury Grama–Schmidta.

15 Nie wyjaśniliśmy jeszcze, co mamy na myśli, wprowadzając „składową” operatora spinu. Wkrótce się tym zajmiemy.

16 Nie próbujemy tu przemycić sloganu politycznego (chodzi o odwołanie do hasła wyborczego Baracka Obamy – przyp. tłum.). Naprawdę. Sloganom mówimy *nie.*

17 Wraz z macierzą jednostkową 2 na 2 nazywa się je też *kwaternionami*.

18 Będziemy od tej pory używać oznaczenia $\vec{\sigma}$, chyba że akurat będzie mowa o składowych, takich jak σ_X.

19 Uważny czytelnik mógłby się tu sprzeciwić, zauważając, że wynik obliczenia tego „zwykłego” iloczynu skalarnego to macierz 2 na 2, a nie zwykła liczba, nie jest on więc do końca „zwykły”. Pewnym pocieszeniem może być fakt, że otrzymany w ten sposób operator macierzowy odpowiada składowej wektora, która naprawdę jest zwykłą liczbą. Okazuje się, że w końcu wszystko działa bezproblemowo.

WYKŁAD 4

Czas i zmiana

Przy końcu baru siedzi samotnie wielki, milczący i wzbudzający respekt mężczyzna. Na jego koszulce widnieje nadruk: „–1”.
– Kim jest ten „Minus Jeden”, gość w kącie? Bramkarzem? – zapytał Art.
– To ktoś więcej niż bramkarz. Ten facet to PRAWO. Bez niego cały ten lokal by się rozsypał – odpowiedział Lenny.

4.1 PRZYPOMNIENIE WERSJI KLASYCZNEJ

By w tomie pierwszym wytłumaczyć znaczenie stanu w mechanice klasycznej, wystarczyło niewiele więcej niż strona. W wersji kwantowej jak dotąd potrzebowaliśmy trzech wykładów, trzech interludiów matematycznych i – zgodnie z moim pobieżnym oszacowaniem – około 17 tysięcy słów, by dotrzeć do tego samego miejsca. Myślę jednak, że najgorsze za nami. Teraz już wiemy, czym jest stan. Trzeba wciąż pamiętać, że w fizyce klasycznej fakt, iż znamy stany układu, oznacza jedynie, że jesteśmy w połowie drogi. Druga połowa wiąże się z zasadą opisującą zmianę stanów w czasie. Tym zajmiemy się teraz.

Przypomnijmy pokrótce, na czym polega zmiana w fizyce klasycznej. W wersji klasycznej przestrzeń stanów jest zbiorem matematycznym. Obowiązująca logika to logika boolowska, a ewolucja stanów w czasie ma charakter deterministyczny

i odwracalny. W najprostszych przykładach, jakimi się zajmowaliśmy, przestrzeń stanów składała się z kilku punktów: orła i reszki w wypadku monety albo zbioru {1, 2, 3, 4, 5, 6} w wypadku kostki. Stany przedstawialiśmy za pomocą narysowanych na stronie punktów, a ewolucję w czasie określała zasada mówiąca, dokąd należy przejść w następnym kroku. Prawo ruchu było więc diagramem ze strzałkami łączącymi stany. Najważniejsza obowiązująca zasada – determinizm – mówiła, że gdziekolwiek się znajdujesz w przestrzeni stanów, następny krok jest ściśle określony przez prawo ruchu. Istniała jednak jeszcze jedna zasada, nazywana zasadą odwracalności. Wiązała się ona z wymaganiem, by prawidłowo zdefiniowane prawo ruchu informowało nas również o tym, skąd dotarliśmy w dane miejsce. Poprawne prawo odpowiada więc diagramowi, w którym tylko jedna strzałka wchodzi do każdego stanu i tylko jedna z niego wychodzi. Te wymagania można też opisać w inny sposób. Nazwałem ten sposób minus pierwszym prawem, ponieważ leży ono u podłoża wszystkich innych zasad. Minus pierwsze prawo mówi, że żadna informacja nigdy nie ginie. Jeśli dwa identyczne i odizolowane od siebie układy znajdują się początkowo w różnych stanach, już zawsze pozostaną w różnych stanach. Co więcej, w przeszłości również zawsze znajdowały się w różnych stanach. Z kolei jeśli dwa identyczne układy w pewnej chwili przyjmują takie same stany, oznacza to, że ich ewolucja w przeszłości oraz w przyszłości musi być również identyczna. Różnice są zachowywane. Kwantowa wersja minus pierwszego prawa ma swoją nazwę: *unitarność*.

4.2 UNITARNOŚĆ

Przyjrzyjmy się układowi zamkniętemu, który w chwili *t* znajduje się w stanie kwantowym $|\Psi\rangle$ (kiedy rozważamy ewolucję układu, tradycyjnie oznaczamy kwantowe stany grecką literą Ψ [psi]). Aby lepiej wskazać, że w konkretnej chwili *t* stan przyjmował wartość $|\Psi\rangle$,

skomplikujmy nieco oznaczenia i nazwijmy nasz stan $|\Psi(t)\rangle$. Oczywiście ten zapis sugeruje coś więcej niż tylko, że „w chwili *t* stan przyjmował wartość $|\Psi\rangle$", a mianowicie to, że stan może być inny w innym czasie. Dlatego możemy myśleć o $|\Psi(t)\rangle$ jako zapisie reprezentującym całą historię układu.

Podstawowe założenie mechaniki kwantowej dotyczące zmiany jest takie, że jeśli znamy stan w pewnej chwili, to kwantowe równania ruchu powiedzą nam, jaki będzie on później. Bez utraty ogólności możemy założyć, że ta początkowa chwila to chwila zero, a późniejszy czas to czas *t*. Stan w czasie *t* jest opisany przez pewną operację, którą nazwiemy **U**(*t*) i którą wykonuje się na stanie istniejącym w chwili zero. Bez bardziej szczegółowego określenia właściwości **U**(*t*) powyższe stwierdzenia niewiele wnoszą, nie licząc tego, że $|\Psi(t)\rangle$ jest zdeterminowany przez $|\Psi(0)\rangle$. Przedstawmy tę zależność za pomocą równania:

$$|\Psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t)|\Psi(0)\rangle$$

(4.1)

Operację **U** nazywamy *operatorem rozwoju czasowego* układu.

4.3 DETERMINIZM W MECHANICE KWANTOWEJ

Dotarliśmy do miejsca, w którym musimy wyjaśnić pewne subtelne różnice. Określamy **U**(*t*) tak, by wektor stanu zmieniał się w sposób deterministyczny. Tak, nie pomyliliśmy się: ewolucja w czasie wektora stanowego jest *deterministyczna*. To dla nas bardzo pomyślny fakt, gdyż dzięki niemu dostajemy coś, czego wartości może uda się przewidzieć. Ale jak to pasuje do statystycznego charakteru wyników naszych pomiarów?

Jak już pokazaliśmy, to, że znamy stan kwantowy, wcale nie znaczy, iż możemy z pewnością przewidzieć wynik eksperymentu. Na przykład jeśli wiemy, że stan spinu przyjmuje wartość $|p\rangle$, to umiemy coś powiedzieć o wynikach pomiaru σ_x, ale o wynikach pomiarów σ_z lub σ_y już nie. Z tego powodu równanie 4.1 nie jest równoważne klasycznemu determinizmowi. Klasyczny determinizm pozwala nam przewidzieć wyniki eksperymentów. Ewolucja stanów kwantowych umożliwia natomiast obliczenie prawdopodobieństwa wyników *późniejszych* eksperymentów.

Jest to jedna z podstawowych różnic między mechaniką klasyczną a kwantową. Sięga ona do związku między stanami i pomiarami, o którym wspomnieliśmy na samym początku książki. W mechanice klasycznej nie ma żadnej różnicy między stanami a pomiarami. W mechanice kwantowej różnica jest zasadnicza.

4.4 PRZYJRZYJMY SIĘ BLIŻEJ **U(*T*)**

Konwencjonalna mechanika kwantowa nakłada na **U**(t) kilka warunków. Po pierwsze, wymaga, by **U**(t) było operatorem liniowym. Nie jest to zaskakujące. Związki między stanami w mechanice kwantowej zawsze mają charakter liniowy. Pasuje to do koncepcji przestrzeni stanów jako przestrzeni wektorowej. Liniowość nie jest jednak jedynym wymogiem nakładanym na **U**(t) przez mechanikę kwantową. Drugi wymóg jest analogiczny do minus pierwszego prawa: nakazuje *zachowywanie różnic*.

Przypomnij sobie, że w poprzednim wykładzie dowiedzieliśmy się, iż dwa stany są rozróżnialne, jeśli są ortogonalne. Wobec tego dwa różne wektory bazowe, jako prostopadłe do siebie, reprezentują dwa stany rozróżnialne. Przypuśćmy, że $|\Psi(0)\rangle$ i $|\Phi(0)\rangle$ są dwoma takimi stanami, czyli że istnieje eksperyment, w którym możemy je od siebie odróżnić. Stany te muszą więc być ortogonalne:

$$\langle\Psi(0)|\Phi(0)\rangle = 0$$

Prawo zachowywania różnic nakazuje, żeby pozostały one ortogonalne przez cały czas. Możemy to zapisać następująco:

$$\langle \Psi(t) | \Phi(t) \rangle = 0$$

(4.2)

dla wszystkich wartości *t*. Ta zasada ma też pewne konsekwencje dla rozwoju w czasie operatora **U**(*t*). Aby je poznać, zamieńmy najpierw wektor ket z równania 4.1 na odpowiadający mu wektor bra:

$$\langle \Psi(t) | = \langle \Psi(0) | \mathbf{U}^{\dagger}(t)$$

(4.3)

Zwróć uwagę na krzyżyk, który wskazuje na sprzężenie hermitowskie. Teraz wstawmy równania 4.1 i 4.3 do równania 4.2:

$$\langle \Psi(0) | \mathbf{U}^{\dagger}(t) \mathbf{U}(t) | \Phi(0) \rangle = 0$$

(4.4)

Aby przyjrzeć się konsekwencjom ostatniego równania, rozważymy bazę ortonormalną złożoną z wektorów $|i\rangle$. Może ona być zupełnie dowolna. Ortonormalność wyraża się w postaci równania:

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}$$

gdzie δ_{ij} to standardowy symbol Kroneckera.

Następnie załóżmy, że $|\Phi(0)\rangle$ i $|\Psi(0)\rangle$ są elementami tej bazy ortonormalnej. Podstawienie w równaniu 4.4 daje:

$$\langle i|\mathbf{U}^{\dagger}(t)\mathbf{U}(t)|j\rangle = 0 \ \ (i \neq j)$$

pod warunkiem że *i* i *j* nie są takie same. Natomiast jeśli *i* i *j* są takie same, to wektory wyjściowe $\mathbf{U}(t)|i\rangle$ i $\mathbf{U}(t)|j\rangle$ też są takie same. W tym wypadku iloczyn skalarny między nimi powinien wynosić 1. Wobec tego ogólna zależność przyjmuje następującą postać:

$$\langle i|\mathbf{U}^{\dagger}(t)\mathbf{U}(t)|j\rangle = \delta_{ij}$$

Inaczej mówiąc, operator $\mathbf{U}^{\dagger}(t)\,\mathbf{U}(t)$, działając między dowolnymi elementami zbioru bazowego, zachowuje się jak operator jednostkowy *I*. Z tego faktu łatwo wynika już, że $\mathbf{U}^{\dagger}(t)\,\mathbf{U}(t)$ działa jak operator jednostkowy I na dowolny stan. Operator **U**, który spełnia warunek

$$\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U} = I$$

nazywamy *unitarnym*. W żargonie fizycznym mówi się, że ewolucja w czasie jest unitarna.

Operatory unitarne odgrywają w mechanice kwantowej bardzo ważną rolę, reprezentując różnego rodzaju przekształcenia przestrzeni stanów. Ewolucja w czasie to tylko jeden przykład. Możemy więc zakończyć ten podrozdział, formułując piątą zasadę mechaniki kwantowej:

- Zasada 5: Ewolucja wektorów stanu w czasie jest unitarna.

***

Ćwiczenie 4.1. Udowodnij, że jeśli U jest operatorem unitarnym, a $|A\rangle$ i $|B\rangle$ są dowolnymi wektorami stanów, to iloczyn skalarny $\mathbf{U}|A\rangle$ i $\mathbf{U}|B\rangle$ jest taki sam jak iloczyn skalarny $|A\rangle$ i $|B\rangle$. Tę zależność można nazwać „zasadą

zachowania nałożeń". Wyraża ona fakt, że zależności logiczne między stanami są zachowywane w czasie.

***

4.5 HAMILTONIAN

Studiując mechanikę klasyczną, poznajemy koncepcję skokowej zmiany czasu. Mechanika kwantowa pod tym względem zachowuje się podobnie: możemy tworzyć skończone skoki czasowe, łącząc wiele nieskończenie małych przedziałów. Takie podejście prowadzi do równania różniczkowego na ewolucję wektora stanu. W tym celu zamienimy przedział czasowy t na nieskończenie mały przedział czasowy ε i dla niego rozważymy operator ewolucji w czasie.

W badaniu skokowych zmian w czasie podstawową rolę odgrywają dwie zasady. Pierwsza to unitarność:

$$\mathbf{U}^{\dagger}(\varepsilon)\mathbf{U}(\varepsilon)=I$$

(4.5)

Druga to ciągłość. Oznacza ona, że wektor stanowy zmienia się w sposób ciągły. Aby to sprecyzować, rozważmy najpierw przypadek, w którym ε wynosi zero. Jest oczywiste, że w takim razie operator ewolucji w czasie to po prostu operator jednostkowy I. Ciągłość oznacza, że jeśli ε jest bardzo małe, to $\mathbf{U}(\varepsilon)$ jest bliski operatora jednostkowego i różni się od niego o wielkość rzędu ε. Możemy więc zapisać:

$$\mathbf{U}(\varepsilon)=I-i\varepsilon\mathbf{H}$$

(4.6)

Być może zastanawiasz się, dlaczego przed **H** wstawiłem znak minus oraz symbol *i*. Na tym etapie te czynniki są zupełnie dowolne. Innymi słowy, ich wybór to konwencja, za którą nie stoi żadna treść fizyczna czy matematyczna. Wybrałem je z myślą o tym, co jeszcze przed nami, kiedy w operatorze **H** rozpoznamy pewien obiekt znany nam już z fizyki klasycznej.

Będziemy też potrzebować wyrażenia opisującego $\mathbf{U}^{\dagger}$. Pamiętając o tym, że sprzężenie hermitowskie wymaga zespolonego sprzężenia współczynników, mamy:

$$\mathbf{U}^{\dagger}(\varepsilon) = I + i\varepsilon\mathbf{H}^{\dagger}$$

(4.7)

W kolejnym kroku wstawiamy równania 4.6 i 4.7 do warunku unitarności w równaniu 4.5:

$$\left(I + i\varepsilon\mathbf{H}^{\dagger}\right)\left(I - i\varepsilon\mathbf{H}\right) = I$$

Rozwinąwszy uzyskaną równość do wyrazów pierwszego rzędu w ε, otrzymujemy

$$\mathbf{H}^{\dagger} - \mathbf{H} = 0$$

czyli w postaci bardziej obrazowej:

$$\mathbf{H}^{\dagger} = \mathbf{H}$$

(4.8)

Ostatnie równanie przedstawia warunek na unitarność, ale mówi nam też, że **H** jest operatorem hermitowskim. Ma to ogromne znaczenie. Możemy teraz stwierdzić, że **H** jest obserwablą i ma

kompletny zbiór wektorów własnych i wartości własnych. W trakcie dalszych rozważań okaże się, że **H** to dobrze znany nam obiekt, a mianowicie *hamiltonian kwantowy*. Jego wartości własne to wartości, które można otrzymać w wyniku pomiaru energii układu kwantowego. To, dlaczego utożsamiliśmy **H** z klasyczną koncepcją hamiltonianu, a jego wartości własne z energią, stanie się wkrótce jasne.

Wróćmy teraz do równania 4.1 i zawęźmy je do przypadku infinitezymalnego, $t = \varepsilon$. Wykorzystując równanie 4.6, dostajemy:

$$\left|\Psi(\varepsilon)\right\rangle = \left|\Psi(0)\right\rangle - i\varepsilon\mathbf{H}\left|\Psi(0)\right\rangle$$

Ostatnie równanie możemy już z łatwością przekształcić w równanie różniczkowe. Najpierw przeniesiemy pierwsze wyrażenie z prawej strony na lewą, a potem podzielimy obie strony przez ε:

$$\frac{\left|\Psi(\varepsilon)\right\rangle - \left|\Psi(0)\right\rangle}{\varepsilon} = -i\mathbf{H}\left|\Psi(0)\right\rangle$$

Jeśli pamiętasz podstawy analizy (zajrzyj do tomu pierwszego po szybkie powtórzenie), po lewej stronie tego równania rozpoznasz coś, co wygląda zupełnie jak definicja pochodnej. Jeśli przejdziemy do granicy z $\varepsilon \to 0$, staje się ona właśnie pochodną po czasie wektora stanu:

$$\frac{\partial\left|\Psi\right\rangle}{\partial t} = -i\mathbf{H}\left|\Psi\right\rangle$$

(4.9)

Początkowy opis układu wybraliśmy tak, by zmienna czasowa była równa zeru. W tym, że $t = 0$, nie ma jednak nic szczególnego. Gdybyśmy wybrali inną wartość czasu i wszystko inne wykonali tak samo, znów uzyskalibyśmy ten sam wynik, czyli równanie 4.9.

Równanie to mówi nam, w jaki sposób zmienia się wektor stanu: jeśli znamy go w pewnej chwili, to ono powie nam, jaki będzie w kolejnej chwili. Odpowiednie równanie jest na tyle istotne, że zyskało własną nazwę. Nazywa się je *uogólnionym równaniem Schrödingera* lub *równaniem Schrödingera zależnym od czasu*. Jeśli znamy hamiltonian, mówi ono nam, jak zmienia się w czasie stan niezakłóconego układu. Art lubi nazywać ten wektor stanu ketem Schrödingera. Chciał nawet ozdobić grecką literę kocimi wąsami[20], ale ja uznałem, że to przesada.

4.6 CO SIĘ STAŁO Z $\hbar$?

Jestem pewien, że wszyscy słyszeliście o stałej Plancka. Sam Planck oznaczył ją symbolem *h* i ustalił jej wartość na 6,6 × 10^{-34} kg m^2/s. Później nieco ją przedefiniowano, dzieląc przez 2π i oznaczając rezultat symbolem $\hbar$:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054571726... \times 10^{-34}\ kg\ m^2/s$$

Dlaczego mamy dzielić *h* przez 2π? Dlatego że w ten sposób oszczędzamy sobie zapisywania 2π w wielu innych miejscach. Biorąc pod uwagę istotność stałej Plancka w mechanice kwantowej, wydaje się dziwne, że jak dotąd nie pojawiła się ona w naszych rozważaniach. Teraz zamierzamy to naprawić.

W mechanice kwantowej – podobnie jak w mechanice klasycznej – hamiltonian jest matematycznym obiektem reprezentującym energię układu. To stwierdzenie narzuca pytanie, które – jeśli śledziliście nasze rozumowanie bardzo uważnie – mogło wzbudzić wasze zdziwienie. Przyjrzyjcie się uważnie równaniu 4.9. Nie ma ono żadnego sensu, jeśli skupi się uwagę na wymiarach. Jeśli pominie się $|\Psi\rangle$ po obu jego stronach, jednostki po lewej stronie to odwrotność czasu. Jeśli hamiltonian kwantowy naprawdę ma być kojarzony

z energią, to jednostki po prawej stronie powinny być jednostkami energii. Energię mierzy się w dżulach [J], czyli w kg m^2/s^2. Okazuje się więc, że nieco rozminąłem się z prawdą. Rozwiązanie tego problemu łączy się z $\hbar$, uniwersalną stałą przyrody, którą wyraża się – co dobrze się składa – w jednostkach kg m^2/s. Stała zawierająca właśnie takie jednostki jest nam potrzebna, by równanie 4.9 nabrało spójności z naszymi stwierdzeniami. Zapiszmy je ze stałą Plancka umieszczoną tak, by całość nabrała sensu pod względem wymiarów:

$$\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = -i\mathbf{H}|\Psi\rangle$$

(4.10)

Dlaczego $\hbar$ przyjmuje tak śmiesznie małą wartość? Odpowiedź wiąże się nie tyle z fizyką, ile z biologią. Tak naprawdę to powinniśmy się pytać nie o to, dlaczego $\hbar$ jest takie małe, ale o to, dlaczego my jesteśmy tacy duzi. Jednostki, których używamy, odzwierciedlają nasze rozmiary. Ustalanie długości metra związane było z mierzeniem liny czy też tkaniny: jest to mniej więcej odległość między nosem człowieka a końcówkami jego wyciągniętych palców. Sekunda trwa mniej więcej tyle co uderzenie serca, a kilogram to po prostu dogodny do noszenia ciężar. Używamy tych jednostek, ponieważ są dla nas wygodne, ale fizyka nie przejmuje się szczególnie naszą wygodą. Rozmiar atomu to około 10^{-10} m. Dlaczego jest tak mały? To pytanie nie ma sensu. Lepiej zapytać, dlaczego w ludzkiej ręce znajduje się tak dużo atomów. Powodem jest to, że aby powstała funkcjonująca, inteligentna i używająca jednostek fizycznych istota, trzeba połączyć bardzo wiele atomów. Dlatego kilogram jest tak wiele razy cięższy od masy atomu – ludzie po prostu nie noszą pojedynczych atomów. Zbyt łatwo można je zgubić. Podobnie rzecz się ma z czasem i naszą długą, wlokącą się sekundą. Ostatecznie więc powodem, dla którego stała Plancka jest taka mała, jest to, że my jesteśmy tacy duzi, ciężcy i powolni.

Fizycy, którzy zajmują się światem mikroskopowym, używają zazwyczaj jednostek bardziej pasujących do zachodzących w nim zjawisk. Gdybyśmy stosowali atomową skalę długości, czasu i masy, wówczas stała Plancka nie byłaby taką małą, nieporęczną liczbą, lecz osiągałaby wartość bliską 1. Tak naprawdę jednostki, przy których stała Plancka równa się 1, są naturalnym wyborem w mechanice kwantowej. W związku z tym fizycy powszechnie ich używają. W równaniach podawanych w tej książce zazwyczaj jednak pozostaniemy przy $\hbar$.

4.7 WARTOŚCI OCZEKIWANE

Zróbmy teraz krótką przerwę w naszych rozważaniach i zajmijmy się pewną istotną kwestią statystyczną: koncepcją przeciętnej lub średniej wartości. Wspomnieliśmy o niej już w poprzednim wykładzie, ale teraz nadszedł czas, by przyjrzeć się jej lepiej.

W mechanice kwantowej średnie wartości nazywamy wartościami oczekiwanymi (pod pewnym względem jest to kiepska nazwa, co wyjaśnię później). Przypuśćmy, że mamy funkcję prawdopodobieństwa określającą wynik eksperymentu mierzącego obserwablę **L**. Wynik musi być jedną z wartości własnych **L**, oznaczanych λ_i, a funkcja prawdopodobieństwa to $P(\lambda_i)$. W statystyce średnia wartość jest oznaczana za pomocą kreski nad mierzoną wielkością. Średnia obserwabli **L** to wobec tego $\bar{\mathbf{L}}$. W mechanice kwantowej zapis jest inny, pochodzi ze sprytnej notacji wektorów bra i ket wprowadzonej przez Paula Diraca. Średnią wartość **L** przedstawiamy więc za pomocą symbolu $\langle \mathbf{L} \rangle$. Wkrótce przekonamy się, dlaczego notacja bra–ket jest tak naturalna, ale najpierw przedyskutujmy znaczenie terminu „średnia”.

Z matematycznego punktu widzenia średnia jest definiowana przez następujące równanie:

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_i \lambda_i P(\lambda_i)$$

(4.11)

Inaczej mówiąc, jest to suma ważona z wagą daną przez funkcję prawdopodobieństwa *P*.

Średnią można też definiować przez eksperyment. Załóżmy, że taki sam eksperyment zostaje powtórzony bardzo wiele razy, a za każdym razem zapisuje się jego wynik. Zdefiniujmy funkcję prawdopodobieństwa w sposób oparty na bezpośrednich obserwacjach. Utożsamiamy $P(\lambda_i)$ z proporcją pomiarów, których wynik wynosił λ_i. Definicja 4.11 odpowiada wówczas eksperymentalnej średniej obserwacji. Podstawowe założenie każdej teorii statystycznej jest takie, że jeśli liczba prób jest wystarczająco duża, to prawdopodobieństwa i średnia uzyskane dzięki obliczeniom matematycznym oraz eksperymentowi będą się zgadzały. Nie będziemy podważać tego założenia.

Przeprowadzę teraz dowód eleganckiego twierdzenia, które wyjaśnia zapis średniej za pomocą wektorów bra i ket. Przypuśćmy, że znormalizowany stan układu kwantowego to $|A\rangle$. Rozwińmy $|A\rangle$ w ortonormalnej bazie wektorów własnych **L**:

$$|A\rangle = \sum_i \alpha_i |\lambda_i\rangle$$

(4.12)

Dla czystej przyjemności, nie mając na razie na myśli żadnego celu, obliczmy wielkość $\langle A|\mathbf{L}|A\rangle$. Znaczenie tego zapisu powinno być jasne: najpierw działamy na $|A\rangle$ operatorem liniowym **L**[21], a następnie obliczamy iloczyn skalarny tego, co otrzymaliśmy w pierwszym kroku, z wektorem bra $\langle A|$. Wykonajmy pierwszy krok, pozwalając **L** zadziałać na obie strony równania 4.12:

$$\mathbf{L}|A\rangle = \sum_i \alpha_i \mathbf{L}|\lambda_i\rangle$$

Pamiętajmy, że wektory $|\lambda_i\rangle$ to wektory własne **L**. Korzystając z faktu, że $\mathbf{L}|\lambda_i\rangle = \lambda_i|\lambda_i\rangle$, możemy napisać:

$$\mathbf{L}|A\rangle = \sum_i \alpha_i \lambda_i |\lambda_i\rangle$$

Ostatni krok to obliczenie iloczynu skalarnego z $\langle A|$. Robimy to, rozwijając wektor bra $\langle A|$ po prawej stronie w bazie wektorów własnych, a następnie wykorzystując ortonormalność wektorów własnych. Otrzymujemy:

$$\langle A|\mathbf{L}|A\rangle = \sum_i \left(\alpha_i^* \alpha_i\right)\lambda_i$$

(4.13)

Wykorzystując zasadę prawdopodobieństwa (zasada 4) do utożsamienia $\alpha_i^* \alpha_i$ z prawdopodobieństwem $P(^{\lambda_i})$, widzimy natychmiast, że wyrażenie po prawej stronie równania 4.13 jest takie samo jak wyrażenie po prawej stronie równania 4.11, czyli:

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \langle A|\mathbf{L}|A\rangle$$

(4.14)

Otrzymaliśmy więc prostą regułę obliczania średniej. Wystarczy wstawić obserwablę między reprezentacje bra i ket wektora stanu.

W poprzednim wykładzie (w podrozdziale 3.5) obiecaliśmy, że wyjaśnimy, w jaki sposób działanie operatora hermitowskiego na wektor stanu jest związane z wynikami pomiarów fizycznych.

Uzbrojeni w wiadomości o wartościach oczekiwanych możemy wreszcie wywiązać się z tej obietnicy. Spójrzmy ponownie na równanie 3.21. Widzimy tam przykładowy operator, σ_z, działający na wektor stanu $|p\rangle$ i w ten sposób tworzący nowy wektor stanu. To równanie możemy uznać za połowę obliczeń potrzebnych do uzyskania wartości oczekiwanej pomiarów σ_z – jest to prawa strona odpowiedniego wyrażenia z obserwablą wciśniętą między wektory bra i ket. Pozostałe obliczenia wiążą się z wykonaniem iloczynu skalarnego tak otrzymanego wektora stanu z wektorem dualnym $\langle p|$. Tak więc kiedy σ_z działa na $|p\rangle$ w równaniu 3.21, tworzy wektor stanu, za pomocą którego można obliczyć prawdopodobieństwa każdego wyniku pomiaru σ_z.

4.8 POMINIĘCIE CZYNNIKA FAZOWEGO

W poprzednim wykładzie powiedzieliśmy, że zawsze możemy ignorować ogólny czynnik fazowy wektora stanu, i obiecaliśmy, że wyjaśnimy, dlaczego tak jest, w późniejszych rozdziałach. Teraz, kiedy wyprowadziliśmy już regułę obliczania średniej, możemy wrócić do tej kwestii.

Co dokładnie znaczy stwierdzenie „możemy pominąć ogólny czynnik fazowy”? Oznacza to, że możemy pomnożyć dowolny wektor stanu przez stały czynnik $e^{i\theta}$, gdzie θ jest liczbą rzeczywistą, bez zmiany fizycznego znaczenia wektora stanu. Aby się o tym przekonać, pomnóżmy równanie 4.12 przez $e^{i\theta}$ i oznaczmy wynik przez $|B\rangle$:

$$|B\rangle = e^{i\theta}|A\rangle = e^{i\theta}\sum_j \alpha_j |\lambda_j\rangle$$

(4.15)

Zauważ, że w sumowaniu zmieniliśmy indeks z *i* na *j*, aby uniknąć pomyłek. Łatwo spostrzec, dlaczego $|B\rangle$ ma taką samą długość jak $|A\rangle$ – chodzi o to, że $e^{i\theta}$ ma moduł (długość) równy jeden:

$$\langle B|B\rangle = \langle Ae^{-i\theta}|e^{i\theta}A\rangle = \langle A|A\rangle$$

Ten sam mechanizm skracania zachowuje również inne wielkości. Przykładowo amplitudy prawdopodobieństwa dla $|A\rangle$, α_j stają się równe $e^{i\theta}\alpha_j$ dla $|B\rangle$, a więc zmieniają swoją wartość. Jednak to nie amplitudy, ale właściwe prawdopodobieństwa mają znaczenie fizyczne. Jeśli układ znajduje się w stanie $|B\rangle$ i dokonujemy jego pomiaru, wynik będzie wartością własną $|\lambda_j\rangle$ z prawdopodobieństwem

$$\alpha_j^* e^{-i\theta} e^{i\theta}\alpha_j = \alpha_j^*\alpha_j$$

co jest tym samym wynikiem, jaki otrzymalibyśmy dla stanu $|A\rangle$. Wreszcie użyjmy tej samej sztuczki do obliczenia wartości oczekiwanej operatora hermitowskiego **L**. Stosując równanie 4.14 do stanu $|B\rangle$, możemy zapisać:

$$\langle \mathbf{L}\rangle = \langle B|\mathbf{L}|B\rangle$$

Dzięki wykorzystaniu równania 4.15 dla $|B\rangle$ dostajemy:

$$\langle \mathbf{L}\rangle = \langle Ae^{-i\theta}|\mathbf{L}|e^{i\theta}A\rangle$$

czyli

$$\langle \mathbf{L}\rangle = \langle A|\mathbf{L}|A\rangle$$

Innymi słowy, **L** ma taką samą wartość oczekiwaną w stanie $|B\rangle$ oraz w stanie $|A\rangle$ – i tym sposobem dotrzymaliśmy wcześniejszej obietnicy.

4.9 ZWIĄZKI Z MECHANIKĄ KLASYCZNĄ

Średnia – lub wartość oczekiwana – obserwabli to w mechanice kwantowej wielkość, która najbliżej odpowiada wartości klasycznej. Gdy rozkład prawdopodobieństwa dla jakiejś obserwabli tworzy zgrabną krzywą o kształcie niezbyt szerokiego dzwonu, to wartość oczekiwana rzeczywiście jest tą, jakiej można się spodziewać, dokonując pomiaru. Jeśli jakiś układ jest tak wielki i ciężki, że mechanika kwantowa nie odgrywa dla niego dużej roli, wówczas wartość oczekiwana obserwabli zachowuje się niemal dokładnie zgodnie z klasycznymi równaniami ruchu. Z tego powodu warto się dowiedzieć, jak wartości oczekiwane zmieniają się w czasie.

Najpierw zadajmy sobie pytanie: dlaczego w ogóle się zmieniają? Dzieje się tak, ponieważ stan układu zmienia się w czasie. Przypuśćmy, że stan w chwili *t* jest reprezentowany przez wektor ket $|\Psi(t)\rangle$ oraz wektor bra $\langle\Psi(t)|$. Wartość oczekiwana obserwabli **L** w chwili *t* to wówczas

$$\langle\Psi(t)|\mathbf{L}|\Psi(t)\rangle$$

Zobaczmy, jak zmienia się ta wartość, różniczkując ją względem *t* i stosując równanie Schrödingera na pochodne czasowe $|\Psi(t)\rangle$ i $\langle\Psi(t)|$. Korzystając ze wzoru na pochodną iloczynu, otrzymujemy

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\mathbf{L}|\Psi(t)\rangle = \left\langle\dot{\Psi}(t)\middle|\mathbf{L}\middle|\Psi(t)\right\rangle + \left\langle\Psi(t)\middle|\mathbf{L}\middle|\dot{\Psi}(t)\right\rangle$$

gdzie kropka – jak zawsze – oznacza pochodną po czasie. **L** nie zależy w sposób jawny od czasu, po prostu więc biernie przygląda się tym operacjom. Wstawiwszy do wektorów bra i ket odpowiednie wersje równania Schrödingera (równania 4.10), otrzymujemy:

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\mathbf{L}|\Psi(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\Psi(t)|\mathbf{HL}|\Psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\Psi(t)|\mathbf{HL}|\Psi(t)\rangle$$

lub zwięźlej:

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\mathbf{L}|\Psi(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\Psi(t)|[\mathbf{HL}-\mathbf{LH}]|\Psi(t)\rangle$$

(4.16)

Jeśli jesteś przyzwyczajony do zwykłej algebry, równanie 4.16 może ci się wydać dość dziwne. Prawa strona zawiera kombinację **HL** – **LH**, która normalnie byłaby równa zeru. Operatory liniowe to jednak nie są zwykłe liczby: kiedy są przez siebie mnożone (lub przykładane jeden po drugim do wektora), kolejność działań okazuje się istotna. Ogólnie rzecz biorąc, kiedy **H** działa na $\mathbf{L}|\Psi\rangle$, otrzymany wynik jest inny niż wtedy, kiedy **L** działa na $\mathbf{H}|\Psi\rangle$. Inaczej mówiąc (z wyjątkiem pewnych specjalnych przypadków), $\mathbf{HL} \neq \mathbf{LH}$. Dla dowolnych dwóch operatorów czy macierzy kombinację

LM – **ML**

nazywa się komutatorem **L** oraz **M** i zapisuje symbolicznie jako:

LM – **ML** = [**L**, **M**].

Warto zauważyć, że dla dowolnej pary operatorów mamy [**L**, **M**] = **–** [**M, L**]. Wyposażeni w notację na komutatory, możemy przedstawić równanie 4.16 w prostszej postaci:

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{L} \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\mathbf{H}, \mathbf{L}] \rangle$$

(4.17)

czyli równoważnie:

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{L} \rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle [\mathbf{L}, \mathbf{H}] \rangle$$

(4.18)

Ostatnie równanie jest ważne i interesujące. Pokazuje związek pochodnej czasowej wartości oczekiwanej obserwabli **L** z wartością oczekiwaną innej obserwabli, $[\mathbf{L}, \mathbf{H}]$.

***

Ćwiczenie 4.2. Udowodnij, że jeśli M i L są operatorami hermitowskimi, to *i*[M, L] również jest hermitowski. Zauważ, że *i* odgrywa tu istotną rolę, gdyż sam komutator nie jest hermitowski.

***

Jeśli założymy, że prawdopodobieństwa układają się w zgrabną krzywą o kształcie wąskiego dzwonu, to równanie 4.18 mówi nam, w jaki sposób szczyt krzywej przemieszcza się w czasie. Takie równania to elementy mechaniki kwantowej, które są najbliższe równań fizyki klasycznej. Niekiedy omijamy nawet nawiasy kwadratowe i zapisujemy odpowiednie równania w postaci:

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\mathbf{L}, \mathbf{H}]$$

(4.19)

Pamiętaj jednak, że kwantowe równanie tego typu powinno być umiejscowione między wektorem bra $\langle\Psi|$ z jednej strony i wektorem ket $|\Psi\rangle$ z drugiej. Możemy też o nim myśleć jako o równaniu pokazującym, jak poruszają się środki rozkładu prawdopodobieństwa.

Czy równanie 4.19 wydaje ci się znajome? Jeśli nie, zajrzyj do wykładów 9 i 10 w tomie pierwszym, gdzie poznaliśmy sformułowanie mechaniki klasycznej przy użyciu nawiasów Poissona. Na stronie 187 można znaleźć następujące równanie[22]:

$$\dot{F} = \{F, H\}$$

(4.20)

W ostatnim równaniu {F, H} nie jest komutatorem – to nawias Poissona. Wciąż jednak równanie 4.20 jest podejrzanie podobne do równania 4.19. Tak naprawdę istnieje ścisła analogia między komutatorami a nawiasami Poissona, a ich własności algebraiczne są również podobne. Na przykład jeśli *F* i *G* przedstawiają operatory, to zarówno komutatory, jak i nawiasy Poissona zmieniają znak, gdy *F* i *G* zamieniają się miejscami. Tę własność odkrył Dirac, który zdał sobie sprawę, że przedstawia ona ważne strukturalne powiązanie między matematyką mechaniki klasycznej a matematyką mechaniki kwantowej. Formalna zależność między komutatorami a nawiasami Poissona wygląda następująco:

$$[\mathbf{F},\mathbf{G}] \;\Leftrightarrow\; i\hbar\{F, G\}$$

(4.21)

Aby umożliwić zestawienie z równaniem 4.19, możemy wstawić do ostatniego wzoru symbole **L** i **H**, których używaliśmy w tym rozdziale.

$$[\mathbf{L},\mathbf{H}] \;\Leftrightarrow\; i\hbar\{L,H\}$$

(4.22)

Spróbujmy sprawić, by odpowiednie utożsamienia były możliwie najbardziej czytelne. Jeśli rozpoczniemy od równania 4.19

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\mathbf{L},\mathbf{H}]$$

a później użyjemy powiązania z równaniem 4.22, by zapisać analogiczną wersję klasyczną, otrzymamy:

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\left(i\hbar\{\mathbf{L},\mathbf{H}\}\right)$$

czyli

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \{\mathbf{L},\mathbf{H}\}$$

co dokładnie pasuje do wzoru z równania 4.20.

***

Ćwiczenie 4.3. Zajrzyj do pierwszego tomu i sprawdź definicję nawiasów Poissona, a następnie udowodnij, że powiązanie w równaniu 4.21 jest spójne pod względem pojawiających się po obu stronach jednostek. Pokaż, że bez czynnika $\hbar$ już takie by nie było.

***

Równanie 4.21 umożliwia rozwiązanie zagadki. W fizyce klasycznej nie ma żadnej różnicy między *FG* i *GF*. Innymi słowy: w przypadku klasycznym komutatory między zwykłymi obserwablami wynoszą zero. Z równania 4.21 wynika, że w mechanice kwantowej komutatory nie równają się zeru, ale są bardzo małe. Klasyczna granica (granica, przy której mechanika klasyczna okazuje się wystarczająco dokładna) jest również granicą, przy której $\hbar$ staje się pomijalnie małe. Jest to więc także granica, przy której mierzone w ludzkich jednostkach komutatory są bardzo małe.

4.10 ZASADA ZACHOWANIA ENERGII

Jak możemy określić, czy jakaś wielkość w mechanice kwantowej jest zachowywana? I co tak naprawdę mamy na myśli, mówiąc, że obserwabla – oznaczmy ją *Q* – jest zachowywana? Na najbardziej podstawowym poziomie oznacza to, że jej wartość oczekiwana $\langle Q \rangle$ nie zmienia się w czasie (chyba że układ zostanie zaburzony). Silniejszym warunkiem jest wymaganie, by $\langle Q^2 \rangle$ (czy też wartość oczekiwana dowolnej potęgi *Q*) nie zmieniała się w czasie.

Patrząc na równanie 4.19, widzimy, że warunek na to, by wartość $\langle Q \rangle$ nie zmieniała się w czasie, to:

$$[\mathbf{Q}, \mathbf{H}] = 0.$$

Innymi słowy, jeśli dana wielkość komutuje z hamiltonianem, jej wartość oczekiwana pozostaje zachowana. Możemy przekształcić to w jeszcze silniejszy warunek. Wykorzystując własności komutatorów, łatwo się przekonać, że jeśli $[\mathbf{H}, \mathbf{Q}] = 0$, to $[\mathbf{Q}^2, \mathbf{H}] = 0$ lub ogólniej $[\mathbf{Q}_n, \mathbf{H}] = 0$ dla dowolnego *n*. Okazuje się, że możemy sformułować silniejszy warunek: jeśli **Q** komutuje z hamiltonianem, to wartości

oczekiwane *wszystkich* funkcji **Q** są zachowane. Takie właśnie znaczenie ma prawo zachowania w mechanice kwantowej.

Najbardziej oczywistą wielkością, która podlega prawu zachowania, jest sam hamiltonian. Ponieważ każdy operator komutuje z samym sobą, możemy zapisać:

$$[\mathbf{H}, \mathbf{H}] = 0,$$

co jest właśnie warunkiem na to, by **H** było zachowywane. Podobnie jak w mechanice klasycznej hamiltonian tak naprawdę oznacza energię układu. Przekonujemy się więc, że w bardzo wielu wypadkach energia w mechanice kwantowej pozostaje zachowana.

4.11 SPIN W POLU MAGNETYCZNYM

Sprawdźmy, jak będzie wyglądało hamiltonowskie równanie ruchu dla pojedynczego spinu. Najpierw będziemy musieli określić hamiltonian. Skąd go weźmiemy? Ogólnie rzecz biorąc, odpowiedź jest taka sama jak w mechanice klasycznej: uzyskamy w wyniku eksperymentu, pożyczymy od jakiejś odpowiadającej nam teorii lub po prostu wybierzemy jakiś i zobaczymy, jak się sprawdzi. Jednak w wypadku pojedynczego spinu nie mamy wielu możliwości. Zacznijmy od operatora jednostkowego I. Ponieważ I komutuje z wszystkimi operatorami, jeśli więc byłby hamiltonianem, nic nie zmieniałoby się w czasie. Pamiętaj, że zależność czasowa obserwabli jest określona przez komutator obserwabli i hamiltonianu.

Jedyną inną możliwością jest suma składowych spinu. Tak naprawdę właśnie taki wynik otrzymalibyśmy w eksperymencie, w którym obserwowalibyśmy rzeczywisty spin – na przykład spin elektronu – w polu magnetycznym. Pole magnetyczne $\vec{B}$ jest 3-wektorem (zwykłym wektorem w przestrzeni), jednoznacznie określonym przez trzy składowe kartezjańskie, B_x, B_y i B_z. Kiedy klasyczny spin (naładowany rotor) umieścimy w polu magnetycznym,

ma on energię, która zależy od jego orientacji. Energia jest proporcjonalna do iloczynu skalarnego spinu i pola magnetycznego. Wersja kwantowa tego faktu wygląda następująco:

$$H \sim \vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z$$

gdzie symbol ~ oznacza „proporcjonalne do". Pamiętaj, że σ_x, σ_y i σ_z reprezentują składowe *operatora* spinu w powyższej kwantowej wersji.

Rozpatrzmy prosty przykład, w którym pole magnetyczne jest skierowane wzdłuż osi *z*. W takim wypadku hamiltonian będzie proporcjonalny do σ_z. Dla wygody złączymy wszystkie liczbowe stałe, włączając w to natężenie pola (ale nie $\hbar$), w jedną stałą ω i zapiszemy:

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z$$

(4.23)

Powód, dla którego w mianowniku pojawiła się liczba 2, wkrótce stanie się jasny.

Naszym celem jest dowiedzenie się, jak wartość oczekiwana spinu zmienia się w czasie, czyli ustalenie wartości $\langle\sigma_x(t)\rangle$, $\langle\sigma_y(t)\rangle$ i $\langle\sigma_z(t)\rangle$. Aby to zrobić, wrócimy do równania 4.19 i wstawimy do niego za **L** odpowiednie składowe. Otrzymamy wtedy:

$$\left\langle \dot{\sigma}_x \right\rangle = -\frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\sigma_x, \mathbf{H}\right] \right\rangle$$

$$\left\langle \dot{\sigma}_y \right\rangle = -\frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\sigma_y, \mathbf{H}\right] \right\rangle$$

$$\left\langle \dot{\sigma}_z \right\rangle = -\frac{i}{\hbar}\left\langle [\sigma_z, \mathbf{H}] \right\rangle$$

(4.24)

Wstawiwszy następnie $\mathbf{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z$ z równania 4.23, dostajemy:

$$\left\langle \dot{\sigma}_x \right\rangle = -\frac{i\omega}{2}\left\langle [\sigma_x, \sigma_z] \right\rangle$$

$$\left\langle \dot{\sigma}_y \right\rangle = -\frac{i\omega}{2}\left\langle [\sigma_y, \sigma_z] \right\rangle$$

$$\left\langle \dot{\sigma}_z \right\rangle = -\frac{i\omega}{2}\left\langle [\sigma_z, \sigma_z] \right\rangle$$

(4.25)

Wyrażenia, które obliczamy po lewej stronie powyższych równań, mają odpowiadać rzeczywistym wielkościom. Czynnik *i* występujący w równaniach zdaje się więc przeszkodą. Na szczęście przyjdą nam z pomocą związki komutacyjne między σ_x, σ_y i σ_z. Podstawiając do równania macierze Pauliego z równania 3.20, łatwo sprawdzić, że:

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$$

$$[\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x$$

$$[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y$$

(4.26)

W każdym z tych równań również występuje czynnik *i*, który skróci się z *i* z równania 4.25. Zauważ, że współczynnik 2 również się skraca, co w rezultacie daje bardzo proste równania:

$$\left\langle \dot{\sigma}_x \right\rangle = -\omega \left\langle \sigma_y \right\rangle$$

$$\left\langle \dot{\sigma}_y \right\rangle = \omega \left\langle \sigma_x \right\rangle$$

$$\left\langle \dot{\sigma}_z \right\rangle = 0$$

(4.27)

Czy coś ci to przypomina? Jeśli nie, zajrzyj jeszcze raz do wykładu 10 z tomu pierwszego. Badaliśmy tam klasyczny rotor umieszczony w polu magnetycznym. Równania były takie same, jedyna różnica polegała na tym, że zamiast wartości oczekiwanych badaliśmy rzeczywisty ruch deterministycznego układu. Zarówno w tamtym, jak i obecnym przykładzie rozwiązanie pokazuje, że operator wektorowy $\vec{\sigma}$ (lub 3-wektor $\vec{L}$ w tomie pierwszym) porusza się jak żyroskop wokół osi pola magnetycznego. Precesja jest jednostajna, odbywa się z prędkością kątową ω.

To podobieństwo do mechaniki klasycznej jest bardzo satysfakcjonujące, ale musimy pamiętać o istotnych różnicach. Co właściwie wykonuje ruch precesyjny? W mechanice klasycznej są to składowe *x* i *y* momentu pędu. W mechanice kwantowej zaś – pewna wartość oczekiwana. Wartość oczekiwana pomiaru σ_z nie zmienia się w czasie, ale pozostałe dwie wartości oczekiwane już tak. Niezależnie od tego, wynik każdego pojedynczego pomiaru każdej składowej spinu to wciąż +1 lub –1.

***

Ćwiczenie 4.4. Pokaż, że prawdziwe są związki komutacyjne podane w równaniach 4.26.

***

4.12 ROZWIĄZYWANIE RÓWNANIA SCHRÖDINGERA

Słynne równanie Schrödingera, które czasem pojawia się na podkoszulkach, ma następującą postać:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2}+U(x)\Psi(x)$$

Na razie nie będziemy się przejmować znaczeniem pojawiających się w nim symboli. Zauważmy jedynie, że jest to równanie, które informuje nas, jak coś zmienia się w czasie. (To „coś" jest reprezentacją wektora stanu cząstki).

Legendarne równanie Schrödingera jest specjalnym przypadkiem bardziej ogólnego równania, które spotkaliśmy już wcześniej, równania 4.9. Jest po części definicją, a po części zasadą mechaniki kwantowej. Jako zasada informuje nas o tym, że wektor stanu zmienia się w czasie w sposób ciągły i zgodny z regułą unitarności. Jako definicja – określa hamiltonian, a więc obserwablę nazywaną energią. Równanie 4.10,

$$\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t}=-i\mathbf{H}|\Psi\rangle$$

nazywa się niekiedy równaniem Schrödingera zależnym od czasu. Ponieważ operator hamiltonianu **H** reprezentuje energię, obserwowalne wielkości energii to po prostu wartości własne **H**. Oznaczmy je przez E_j, a odpowiadające im wektory własne przez $|E_j\rangle$

. Z definicji związek między **H**, E_j i $|E_j\rangle$ jest po prostu równaniem na wartości własne:

$$\mathbf{H}|E_j\rangle = E_j|E_j\rangle$$

(4.28)

Tak właśnie wygląda *równanie Schrödingera zależne od czasu*. Można je stosować na dwa sposoby.

Jeśli pracujemy z wykorzystaniem konkretnej bazy macierzowej, ostatnie równanie wyznacza wektory własne **H**. Aby je znaleźć, wystarczy podstawić konkretną wartość energii E_j i poszukać wektora ket $|E_j\rangle$ będącego rozwiązaniem tego równania.

Równanie to również określa wartości własne E_j. Jeśli wstawisz do niego dowolną wartość E_j, to zazwyczaj nie będzie można rozwiązać równania, czyli znaleźć odpowiedniego wektora własnego. Rozważmy prosty przykład: załóżmy, że hamiltonian to macierz $\frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z$. Ponieważ σ_z charakteryzują jedynie dwie wartości własne, czyli +1 i –1, hamiltonian również ma tylko dwie wartości własne, $\pm\frac{\hbar\omega}{2}$. Jeśli do prawej strony równania 4.28 wstawisz jakąkolwiek inną wartość, nie będzie ono miało rozwiązania. Jako że operator **H** reprezentuje energię, E_j często nazywamy *wartościami własnymi energii*, a $|E_j\rangle$ – *wektorami własnymi energii* układu.

***

<u>Ćwiczenie 4.5. Dla dowolnego jednostkowego 3-wektora $\vec{n}$ utwórz operator</u>

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma\cdot\vec{n}$$

Znajdź wartości własne i wektory własne energii, rozwiązując równanie Schrödingera zależne od czasu. Pamiętaj, że równanie 3.23 przedstawia konkretne składowe $\sigma \cdot \vec{n}$.

***

Załóżmy, że znaleźliśmy już wszystkie wartości własne E_j energii oraz odpowiadające im wektory własne $|E_j\rangle$. Możemy teraz wykorzystać te wyniki do rozwiązania równania Schrödingera zależnego od czasu. Cała sztuka polega na tym, by skorzystać z faktu, że wektory własne tworzą bazę ortonormalną, a potem rozwinąć wektor stanu w tej bazie. Oznaczmy wektor stanu przez $|\Psi\rangle$. Mamy wtedy:

$$|\Psi\rangle = \sum_j \alpha_j |E_j\rangle$$

Ponieważ wektor stanu $|\Psi\rangle$ zmienia się w czasie, a wektory bazowe nie, współczynniki α_j również muszą zależeć od czasu:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \alpha_j(t) |E_j\rangle$$

(4.29)

W kolejnym kroku wstawmy równanie 4.29 do równania zależnego od czasu. Otrzymamy wtedy

$$\sum_j \dot{\alpha}_j(t) |E_j\rangle = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{H} \sum_j \alpha_j(t) |E_j\rangle$$

Następnie wykorzystamy fakt, że $\mathbf{H}|E_j\rangle = E_j |E_j\rangle$, uzyskując:

$$\sum_j \dot{\alpha}_j(t)\left|E_j\right\rangle = -\frac{i}{\hbar}\sum_j E_j\alpha_j(t)\left|E_j\right\rangle$$

lub, po przegrupowaniu wyrazów:

$$\sum_j \left\{\dot{\alpha}_j(t)+\frac{i}{\hbar}E_j\alpha_j(t)\right\}\left|E_j\right\rangle = 0$$

Ostatni krok powinien być już łatwy do dostrzeżenia. Skoro suma wektorów bazowych równa się zeru, każdy współczynnik musi być zerem. Tak więc dla każdej wartości własnej E_j, $a_j(t)$ musi spełniać proste równanie różniczkowe:

$$\frac{d\alpha_j(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}E_j\alpha_j(t)$$

Ostatnie równanie to oczywiście znane nam już równanie różniczkowe, którego rozwiązaniem jest funkcja wykładnicza zmiennej czasowej, w tym wypadku z wykładnikiem urojonym. Wzorem zapisujemy ją w postaci

$$\alpha_j(t) = \alpha_j(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}$$

(4.30)

Równanie to mówi nam, jak α_j zmienia się w czasie. Ma ono dość ogólny charakter i nie ogranicza się do spinów, pod warunkiem że hamiltonian nie zależy w sposób jawny od czasu. Jest to pierwszy w tej książce przykład głębokiego powiązania między energią a częstotliwością, które w mechanice kwantowej oraz kwantowej teorii pola pojawia się bardzo regularnie. Będziemy często do niego wracać.

W równaniu 4.30 czynniki $\alpha_j(0)$ są wartościami współczynników w czasie równym zeru. Jeśli znamy wektor stanu $|\Psi\rangle$ w czasie zero, wówczas współczynniki te są zadane przez rzutowania $|\Psi\rangle$ na bazowe wektory własne. Możemy zapisać to jako:

$$\alpha_j(0) = \langle E_j | \Psi(0) \rangle$$

(4.31)

Złóżmy teraz te wszystkie elementy w całość i zapiszmy kompletne rozwiązanie równania Schrödingera zależnego od czasu:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \alpha_j(0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t} |E_j\rangle$$

Kiedy użyjemy równania 4.31, by zastąpić $\alpha_j(0)$, ostatnie równanie przyjmuje postać

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \langle E_j | \Psi(0) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t} |E_j\rangle$$

(4.32)

Równanie 4.32 można zapisać w sposób bardziej elegancki:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j |E_j\rangle \langle E_j | \Psi(0) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}$$

(4.33)

podkreślając tym samym fakt, że sumujemy po wektorach bazowych.

Być może zastanawiasz się, jak to się stało, że „znaliśmy” $|\Psi(0)\rangle$. Odpowiedź zależy od okoliczności, ale zazwyczaj zakładamy, że możemy skorzystać z jakiegoś urządzenia, by przygotować układ w znanym stanie.

Zanim przedyskutujemy szersze znaczenie tych równań, chciałbym ponownie je przedstawić, tym razem w formie „przepisu”. Będę zakładał, że czytelnik wie wystarczająco dużo o układzie i jego przestrzeni stanów, żebyśmy mogli się do tego zabrać.

4.13 PRZEPIS NA KET(A) SCHRÖDINGERA

1. Wyznacz, spisz z podręcznika, zgadnij, pożycz lub ukradnij operator hamiltonianu **H**.
2. Przygotuj stan początkowy $|\Psi(0)\rangle$.
3. Wylicz wartości i wektory własne **H**, rozwiązując równanie Schrödingera zależne od czasu:

$$\mathbf{H}|E_j\rangle = E_j|E_j\rangle$$

4. Wykorzystaj początkowy wektor stanu $|\Psi(0)\rangle$ oraz wektory własne $|E_j\rangle$ z kroku 3, by obliczyć początkowe współczynniki $\alpha_j(0)$*:*

$$\alpha_j(0) = \langle E_j|\Psi(0)\rangle$$

5. Przedstaw $|\Psi(0)\rangle$ w zależności od wektorów własnych $|E_j\rangle$ i początkowych współczynników $\alpha_j(0)$:

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_j \alpha_j(0)|E_j\rangle$$

Na razie rozpisaliśmy początkowy wektor stanu $|\Psi(0)\rangle$ w języku wektorów własnych $|E_j\rangle$ operatora **H**. Dlaczego ta baza jest lepsza od innych? Ponieważ **H** *informuje nas, jak rzeczy zmieniają się w czasie*. Teraz wykorzystamy tę wiedzę.

6. W powyższym równaniu zamień każde $\alpha_j(0)$ na $\alpha_j(t)$, by oddać zależność czasową współczynników. W wyniku tego $|\Psi(0)\rangle$ staje się $|\Psi(t)\rangle$:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \alpha_j(t)|E_j\rangle$$

7. Wykorzystując równanie 4.30, zamień każde $\alpha_j(t)$ na $\alpha_j(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}$:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \alpha_j(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}|E_j\rangle$$

(4.34)

8. Dopraw do smaku.

Możemy teraz przedstawić prawdopodobieństwo każdego możliwego wyniku eksperymentu jako funkcję zależną od czasu. Nie jesteśmy ograniczeni do pomiarów energii. Załóżmy, że **L** ma wartości własne λ_j i wektory własne $|\lambda_j\rangle$. Prawdopodobieństwo otrzymania wyniku λ wynosi:

$$P_\lambda(t) = \left|\langle\lambda|\Psi(t)\rangle\right|^2$$

***

<u>Ćwiczenie 4.6. Wykonaj wszystkie kroki opisane w przepisie na ket(a) Schrödingera dla pojedynczego</u>

spinu. Hamiltonian ma wtedy postać $\mathbf{H} = \frac{\omega\hbar}{2}\sigma_z$, a badana obserwabla to σ_x. Stan początkowy jest zadany przez $|g\rangle$ (stan, w którym $\sigma_z = +1$).

Kiedy mija czas t, wykonujemy eksperyment oparty na pomiarze σ_y. Jakie są możliwe wyniki i ich prawdopodobieństwa?

Gratulacje! Właśnie rozwiązałeś rzeczywisty problem z mechaniki kwantowej dotyczący eksperymentu, który można faktycznie przeprowadzić w laboratorium. Możesz się z dumą poklepać po plecach.

***

4.14 KOLAPS

Dowiedzieliśmy się już, jak zmienia się wektor stanu między czasem, kiedy układ jest przygotowany w danym stanie, a czasem, kiedy następuje kontakt z urządzeniem i dokonuje się pomiar. Gdyby wektory stanu były głównym obiektem badań fizyki eksperymentalnej, moglibyśmy powiedzieć, że mechanika kwantowa jest deterministyczna. Jednakże fizyka eksperymentalna to coś innego niż analiza własności wektora stanu – jej głównym celem jest pomiar obserwabli. Nawet jeśli świetnie znamy wektor stanu, nie wiemy, jaki będzie wynik pomiaru. Mimo to prawdziwe będzie stwierdzenie, że między pomiarami stan układu zmienia się w ściśle określony sposób, zgodny z równaniem Schrödingera zależnym od czasu.

Kiedy jednak następuje pomiar, dzieje się zupełnie inaczej. Eksperyment mierzący **L** da wynik, którego nie sposób przewidzieć, ale po dokonaniu pomiaru układ wyląduje w pewnym stanie

własnym **L**. W którym stanie własnym? Akurat w tym, który odpowiada wynikowi pomiaru. Wynik ten jednak jest niemożliwy do przewidzenia. Z tego wniosek, że podczas eksperymentu stan układu przeskakuje w nieprzewidywalny sposób do stanu własnego obserwabli, której pomiaru dokonujemy. To zjawisko *nazywamy kolapsem funkcji falowej*[23].

Aby przedstawić to w inny sposób, załóżmy, że tuż przed pomiarem **L** wektor stanu to

$$\sum_j \alpha_j |\lambda_j\rangle$$

Losowo, z prawdopodobieństwem $|\alpha_j|^2$, urządzenie mierzy wartość λ_j i pozostawia układ w jednym ze stanów własnych **L**, a dokładnie w stanie $|\lambda_j\rangle$. Cała superpozycja stanów ulega kolapsowi do pojedynczego wyrazu.

Ten dziwny fakt, mówiący, że układ zmienia się w pewien sposób pomiędzy pomiarami i w pewien inny sposób podczas pomiarów, już od dziesięcioleci stanowi źródło sporów i zakłopotania. Naturalnie pojawia się pytanie, czy sam pomiar nie powinien również podlegać prawom mechaniki kwantowej.

Odpowiedź na to pytanie brzmi: tak. Prawa mechaniki kwantowej nie ulegają zawieszeniu na czas pomiaru. Jednak aby badać proces pomiaru jako ewolucję kwantowomechaniczną, musimy wziąć pod uwagę całość doświadczalnej konfiguracji, razem z urządzeniem pomiarowym traktowanym jako część pojedynczego układu kwantowego. Wrócimy jeszcze do tego tematu – czyli do zagadnienia opisującego, jak układy łączą się w układy złożone – w wykładzie 6. Najpierw jednak zajmiemy się nieoznaczonością.

20 No dobrze, tak naprawdę wcale tego nie chciał.

21 Otrzymalibyśmy ten sam wynik, gdybyśmy przyjęli, że najpierw **L** działa na $\langle A|$.

22 Tom 1, wykład 9, równanie 10. Kolejny z eleganckich francuskich wynalazków.

23 Jeszcze nie mówiliśmy o tym, co to jest funkcja falowa, ale wkrótce – w podrozdziale 5.1.2 – zajmiemy się tą kwestią.

WYKŁAD 5

Nieoznaczoność i zależność od czasu

– O, witam! – Lenny ucieszył się na widok wchodzącej do „Hilberta" kobiety o nieokreślonym wyglądzie.
– Lenny? To naprawdę ty? Kopę lat! A przynajmniej kilkanaście. Z kim tu przesiadujesz? – zapytała przybyła.
– To Art. Art, przywitaj się z Zasadą Nieoznaczoności.

5.1 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – ZBIORY ZUPEŁNE KOMUTUJĄCYCH OBSERWABLI

5.1.1 STANY, KTÓRE ZALEŻĄ OD CO NAJMNIEJ JEDNEJ MIERZALNEJ WIELKOŚCI

Fizyka pojedynczego spinu jest wyjątkowo prosta, co czyni z tego układu świetny przykład. Oznacza to jednak też, że nie da się przy jego użyciu zilustrować wszystkich aspektów mechaniki kwantowej. Jedna z własności pojedynczego spinu mówi, że jego stan można w pełni określić, podając wartość własną pojedynczego operatora, powiedzmy σ_z. Jeśli wartość σ_z jest znana, to nie można określić

wartości żadnej innej obserwabli, takiej jak na przykład σ_x. Jak się przekonaliśmy, pomiar jednej z tych wielkości niszczy wszystkie informacje, jakie mogliśmy mieć o drugiej z nich.

W bardziej złożonych układach może jednak istnieć więcej obserwabli, które są ze sobą kompatybilne, czyli których wartości można określić jednocześnie. Oto dwa przykłady:

- Cząstka poruszająca się w trójwymiarowej przestrzeni. Bazę stanów w tym układzie określa położenie cząstki, któremu odpowiadają trzy współrzędne przestrzenne. Stany są więc opisywane trzema liczbami, $|x, y, z\rangle$. Później przekonamy się, że wszystkie trzy współrzędne można określić jednocześnie.
- Układ złożony z dwóch fizycznie niezależnych spinów: innymi słowy, układ dwóch kubitów. Wkrótce dowiemy się, jak łączyć układy ze sobą. Na razie możemy po prostu stwierdzić, że układ składający się z dwóch spinów można opisać za pomocą dwóch obserwabli. Ściśle mówiąc, dysponujemy stanem, w którym oba spiny są skierowane w górę, stanem, w którym oba są skierowane w dół, następnym, w którym pierwszy jest skierowany w górę, a drugi w dół, oraz ostatnim, w którym ta kolejność ulega zamianie. W skrócie: układ dwóch spinów daje się opisać przy użyciu dwóch obserwabli, składowej *z* pierwszego spinu oraz składowej *z* drugiego spinu. Mechanika kwantowa nie zabrania uzyskania jednocześnie wiedzy o tych dwóch obserwablach. Tak naprawdę możemy wybrać dowolną składową pierwszego spinu i dowolną składową drugiego, a mechanika kwantowa pozwoli nam dowiedzieć się jednocześnie o wartościach obydwu.

W takich wypadkach do pełnej charakterystyki stanu układu nie wystarcza pojedynczy pomiar. Na przykład w układzie z dwoma spinami musimy zmierzyć każdy spin z osobna, wiążąc z każdym z tych pomiarów inny operator. Oznaczmy odpowiednie operatory symbolami **L** i **M**.

Pomiar powoduje, że układ ląduje w stanie własnym (składającym się z pojedynczego wektora własnego) odpowiadającym wartości

(wartości własnej), którą zmierzono. Jeśli w układzie złożonym z dwóch spinów zmierzymy obydwa z nich, to układ znajdzie się w stanie będącym jednocześnie wektorem własnym **L** i wektorem własnym **M**. Nazwiemy go *jednoczesnym wektorem własnym* operatorów **L** i **M**.

Przykład z dwoma spinami pozwala nam myśleć o konkretnym układzie, ale powinniśmy pamiętać, że nasze wyniki będą dużo ogólniejsze – będą dotyczyć każdego układu opisywanego przez dwa różne operatory. Jak się pewnie domyślasz, w liczbie dwa nie ma nic magicznego. Przedstawione tu idee łatwo uogólnić do bardziej złożonych układów, do których opisu potrzeba wielu operatorów.

Aby móc się zajmować dwoma różnymi kompatybilnymi operatorami, będziemy potrzebować dwóch zbiorów oznaczeń na ich wektory bazowe. Wybierzemy symbole λ_i i μ_a. Ustalmy więc, że λ_i i μ_a to wartości własne **L** i **M**. Indeksy dolne, *i* oraz *a*, będą przebiegać wszystkie możliwe wyniki pomiarów **L** i **M**. Zakładamy, że dysponujemy bazą wektorów stanu $|\lambda_i, \mu_a\rangle$ będących jednoczesnymi wartościami własnymi obydwu obserwabli. Inaczej mówiąc,

$$\mathbf{L}|\lambda_i, \mu_a\rangle = \lambda_i |\lambda_i, \mu_a\rangle$$

$$\mathbf{M}|\lambda_i, \mu_a\rangle = \mu_a |\lambda_i, \mu_a\rangle$$

Możemy zapisać te równania nieco mniej precyzyjnie, ale też czytelniej, opuszczając indeksy dolne:

$$\mathbf{L}|\lambda, \mu\rangle = \lambda |\lambda, \mu\rangle$$

$$\mathbf{M}|\lambda, \mu\rangle = \mu |\lambda, \mu\rangle$$

Skoro ma istnieć baza złożona z jednoczesnych wektorów własnych, operatory **L** i **M** muszą ze sobą komutować. Łatwo się

o tym przekonać: zacznijmy od działania na każdy z wektorów bazowych operatorem **LM**, korzystając z faktu, że wektor bazowy jest jednoczesnym wektorem własnym zarówno **L**, jak i **M**:

$$\mathbf{LM}\left|\lambda,\mu\right\rangle = \mathbf{L}\mu\left|\lambda,\mu\right\rangle$$

czyli

$$\mathbf{LM}\left|\lambda,\mu\right\rangle = \lambda\mu\left|\lambda,\mu\right\rangle$$

Wartości własne λ i μ to oczywiście po prostu liczby i ich kolejność przy wykonywaniu mnożenia nie odgrywa żadnej roli. Tak więc jeśli przestawimy odpowiednie operatory i zadziałamy operatorem **ML** na ten sam wektor bazowy, otrzymamy identyczny wynik:

$$\mathbf{LM}\left|\lambda,\mu\right\rangle = \mathbf{ML}\left|\lambda,\mu\right\rangle$$

co można w skrócie zapisać w postaci

$$\left[\mathbf{L},\mathbf{M}\right]\left|\lambda,\mu\right\rangle = 0$$

(5.1)

gdzie po prawej stronie pojawia się wektor zerowy. Ten wniosek nie byłby zbyt przydatny, gdyby chodziło o jeden szczególny wektor bazowy. Rozumowanie, które doprowadziło nas do równania 5.1, pozostaje jednak w mocy dla *dowolnego* wektora bazowego. To już wystarcza, żeby stwierdzić, że operator [**L**,**M**] = 0. Jeśli operator *anihiluje* każdy element bazy, to musi też anihilować każdy wektor rozważanej przestrzeni wektorowej[24]. Operator, który anihiluje każdy wektor, to właśnie operator zerowy. Udowodniliśmy więc, że jeśli istnieje baza składająca się z jednoczesnych wektorów własnych dwóch obserwabli, to obserwable te muszą ze sobą komutować.

Okazuje się, że prawdziwe jest również twierdzenie odwrotne: jeśli dwie obserwable komutują ze sobą, to istnieje dla nich zupełna baza jednoczesnych wektorów własnych. Prościej można to podsumować następująco: dwie obserwable są jednocześnie mierzalne właśnie wtedy, gdy ze sobą komutują.

Jak wspomnieliśmy wcześniej, twierdzenie to jest dużo ogólniejsze. Czasami by odpowiednio oznaczyć wektory bazowe, trzeba określić więcej obserwabli. Niezależnie od tego, ile ich będzie, muszą one wszystkie ze sobą komutować. Nazywamy je wtedy wspólnie *zupełnym zbiorem komutujących obserwabli*.

5.1.2 Funkcje falowe

Wprowadzimy teraz pojęcie *funkcji falowej*, ignorując początkowo pochodzenie tej nazwy – kwantowa funkcja falowa nie musi mieć nic wspólnego z falami. Później, kiedy zajmiemy się mechaniką kwantową cząstek (w wykładach 8–10), dowiemy się o związkach między funkcjami falowymi a falami.

Przypuśćmy, że dysponujemy bazą stanów jakiegoś układu kwantowego. Oznaczmy ortonormalne wektory tej bazy przez $|a,b,c\ldots\rangle$, gdzie *a, b, c...* to wartości własne pewnego zupełnego zbioru komutujących obserwabli **A, B, C**... Rozważmy następnie dowolny wektor stanu $|\Psi\rangle$. Ponieważ wektory $|a,b,c\ldots\rangle$ tworzą bazę ortonormalną, $|\Psi\rangle$ można przedstawić przy ich użyciu:

$$|\Psi\rangle = \sum_{a,b,c\ldots} \psi(a,b,c\ldots)\,|\,a,b,c\ldots\rangle$$

Liczby $\psi(a,b,c\ldots)$ to pojawiające się w odpowiednim rozwinięciu współczynniki. Każda z nich jest równa iloczynowi skalarnemu $|\Psi\rangle$ z odpowiednim wektorem bazowym:

$$\psi(a,b,c\ldots) = \langle a,b,c\ldots\,|\Psi\rangle$$

(5.2)

Zestaw współczynników $\psi(a,b,c\ldots)$ nazywa się funkcją falową układu w bazie zadanej przez obserwable **A, B, C**... Matematyczna definicja funkcji falowej to po prostu równanie 5.2. Może się to wydawać stosunkowo formalne i abstrakcyjne, ale funkcja falowa niesie w sobie głębokie i fundamentalne znaczenie fizyczne. Zgodnie z podstawową probabilistyczną zasadą rządzącą mechaniką kwantową kwadrat modułu funkcji falowej jest równy prawdopodobieństwu tego, że komutujące obserwable przyjmą wartości *a, b, c...*:

$$P(a,b,c\ldots) = \psi^*(a,b,c\ldots)\,\psi(a,b,c\ldots)$$

Postać funkcji falowej zależy od tego, na których obserwablach zdecydujemy się skupić uwagę. Wynika to z faktu, że rachunki wykonywane dla różnych obserwabli wiążą się z zastosowaniem różnych zbiorów wektorów bazowych. I tak na przykład dla pojedynczego spinu iloczyny skalarne

$$\psi(g) = \langle g|\Psi\rangle$$

i

$$\psi(d) = \langle d|\Psi\rangle$$

definiują funkcję falową w bazie σ_z, a

$$\psi(p) = \langle p|\Psi\rangle$$

i

$$\psi(l) = \langle l|\Psi\rangle$$

definiują funkcję falową w bazie σ_x.

Ważna własność funkcji falowej wynika z tego, że całkowite prawdopodobieństwo musi być równe 1:

$$\sum_{a,b,c\ldots} \psi^*(a,b,c\ldots)\,\psi(a,b,c\ldots) = 1$$

5.1.3 Uwaga dotycząca terminologii

Terminu *funkcja falowa* będziemy w tej książce używać jako określenia zbioru współczynników (zwanych też składowymi) występujących przy odpowiednich wektorach bazowych w rozwinięciu na funkcje własne. Jeśli na przykład rozwinięcie wektora $|\Psi\rangle$ wygląda następująco

$$|\Psi\rangle = \sum_j \alpha_j |\psi_j\rangle$$

gdzie $|\psi_j\rangle$ są ortonormalnymi wektorami własnymi operatora hermitowskiego, to za funkcję falową będziemy uważać zbiór współczynników a_j – liczb, które wcześniej oznaczaliśmy $\psi(a,b,c\ldots)$. Wówczas gdy wektor stanu wyraża się jako całka, a nie zwykła suma, funkcja falowa jest ciągła, a nie dyskretna.

Dotąd starannie odróżnialiśmy funkcję falową od wektorów stanu $|\Psi\rangle$, tak jak robi to większość autorów. Niektórzy jednak mówią o funkcji falowej tak, jakby była tym samym co odpowiednie wektory stanu. Taka niejednoznaczność może być myląca, ale staje się jaśniejsza, jeśli uświadomimy sobie, że funkcja falowa naprawdę może przedstawiać wektor stanu. O współczynnikach a_j można myśleć jako o współrzędnych wektora stanu w pewnej konkretnej bazie wektorów własnych. Przypomina to stwierdzenie, że zestaw współrzędnych kartezjańskich przedstawia pewien punkt w 3-przestrzeni względem ustalonego układu współrzędnych. Aby

uniknąć niejasności, wystarczy pamiętać, z której umowy korzysta się w danym momencie. W tej książce będziemy zwykle używać wielkich liter, takich jak Ψ, do oznaczania wektorów stanu, a małych liter, takich jak ψ, do oznaczania funkcji falowych.

5.2 POMIAR

Wróćmy do pojęcia pomiaru. Przypuśćmy, że w pojedynczym pomiarze mierzymy dwie obserwable, **L** i **M**, tak że układ znajduje się następnie w jednoczesnym wektorze własnym tych dwóch obserwabli. Jak przekonaliśmy się w podrozdziale 5.1.1, oznacza to, że **L** i **M** muszą ze sobą komutować.

Co się jednak dzieje, gdy **L** i **M** nie komutują? Wówczas nie zawsze możemy uzyskać jednoznaczne informacje o obydwu z nich. Wkrótce podamy ilościowy opis tego faktu w postaci ogólnej zasady nieoznaczoności. Zasada nieoznaczoności Heisenberga będzie jej szczególnym przypadkiem.

Wróćmy do naszego kamienia węgielnego, problemu pojedynczego spinu. Każdą obserwablę związaną ze spinem można przedstawić przy użyciu hermitowskiej macierzy 2 na 2, a każda taka macierz ma postać

$$\begin{pmatrix} r & w \\ w^* & r' \end{pmatrix}$$

gdzie wyrazy na przekątnej są rzeczywiste, a ten w lewym dolnym rogu jest sprzężeniem tego w prawym górnym rogu. Wynika z tego, że do określenia takiej obserwabli potrzeba czterech rzeczywistych parametrów. Okazuje się, że istnieje zgrabny sposób zapisania dowolnej obserwabli spinowej za pomocą trzech macierzy Pauliego, σ_x, σ_y i σ_z oraz jednej dodatkowej macierzy: macierzy jednostkowej I. Jak pewnie pamiętasz,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Dowolną hermitowską macierz **L** można przedstawić jako sumę czterech wyrazów:

$$\mathbf{L} = a\sigma_x + b\sigma_y + c\sigma_z + dI$$

gdzie *a, b, c* i *d* to liczby rzeczywiste.

***

Ćwiczenie 5.1 Udowodnij ostatnie stwierdzenie.

***

Operator jednostkowy *I* z formalnego punktu widzenia jest obserwablą, jako operator hermitowski, ale ma ona wyjątkowo nudny charakter. Może bowiem przyjąć tylko jedną wartość, czyli 1, a każdy wektor stanu jest jej wektorem własnym. Jeśli zignorujemy trywialną obserwablę *I*, możemy uznać, że najogólniejsza możliwa postać obserwabli to kombinacja liniowa trzech składowych spinu, σ_x, σ_y i σ_z. Czy można jednocześnie zmierzyć jakąś parę składowych

spinu? Aby tak było, musiałyby one ze sobą komutować. W odniesieniu do składowych spinu odpowiednie komutatory łatwo policzyć. Wystarczy wykorzystać postaci macierzowe poszczególnych operatorów, wykonać mnożenia w obu możliwych kolejnościach i odjąć od siebie otrzymane wyniki.

Uzyskane relacje komutacyjne wypisane w równaniach 4.26,

$$\left[\sigma_x, \sigma_y\right] = 2i\sigma_z$$

$$\left[\sigma_y, \sigma_z\right] = 2i\sigma_x$$

$$\left[\sigma_z, \sigma_x\right] = 2i\sigma_y$$

pokazują natychmiast, że nie można jednocześnie zmierzyć żadnych dwóch składowych spinu, gdyż po prawej stronie nigdy nie występuje 0. Tak naprawdę nie można jednocześnie zmierzyć dwóch składowych spinu wzdłuż żadnych osi.

5.3 ZASADA NIEOZNACZONOŚCI

Nieoznaczoność to jedno ze sztandarowych pojęć mechaniki kwantowej, ale nie w każdym wypadku wynik eksperymentu jest obarczony niepewnością. Jeśli układ znajduje się w stanie własnym jakiejś obserwabli, to wynik pomiaru tej obserwabli będzie stuprocentowo pewny. Jednocześnie niezależnie od wybranego stanu zawsze będziemy mieli do czynienia z nieoznaczonością jakiejś obserwabli. Jeśli stan akurat jest wektorem własnym pewnego operatora hermitowskiego – nazwijmy go **A** – to nie będzie wektorem własnym innych operatorów, które nie komutują z **A**. Mówiąc ogólniej, jeśli **A** i **B** nie komutują ze sobą, to musi występować nieoznaczoność dla któregoś z nich, albo dla obydwu.

Klasycznym przykładem niepewności dla powiązanych ze sobą obserwabli jest zasada nieoznaczoności Heisenberga, sformułowana początkowo dla pędu i położenia cząstki. Idee Heisenberga można rozszerzyć do bardzo ogólnej reguły dotyczącej dowolnych dwóch obserwabli, które nie komutują ze sobą. Przykładem takiej pary są dwie składowe spinu. Dysponujemy już wszystkimi informacjami koniecznymi do wyprowadzenia ogólnej postaci zasady nieoznaczoności.

5.4 SENS NIEOZNACZONOŚCI

Zanim podamy ilościowy opis nieoznaczoności, musimy precyzyjnie ustalić, co przez nią rozumiemy. Oznaczmy wartości własne pewnej obserwabli **A** przez *a*. W ustalonym stanie $|\Psi\rangle$ mamy rozkład prawdopodobieństwa *P*(*a*) o naturalnych własnościach. Wartość oczekiwana **A** to zwykła średnia:

$$\langle \Psi | \mathbf{A} | \Psi \rangle = \sum_a a P(a)$$

Z grubsza rzecz biorąc, oznacza to, że rozkład *P*(*a*) jest wyśrodkowany w wartości oczekiwanej. To, co będziemy uważać za „nieoznaczoność" czy też „niepewność" **A**, to tak zwane *odchylenie standardowe*. Aby obliczyć odchylenie standardowe, zaczynamy od odjęcia od **A** jego wartości oczekiwanej. Definiujemy więc nowy operator $\bar{\mathbf{A}}$ wzorem

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle$$

Operator $\bar{\mathbf{A}}$ określiliśmy, odejmując wartość oczekiwaną od innego operatora, i być może nie jest do końca jasne, co to oznacza. Przyjrzyjmy się sytuacji bliżej. Wartość oczekiwana to liczba rzeczywista. Każda liczba rzeczywista to też operator – precyzyjnie

mówiąc, chodzi o operator proporcjonalny do identyczności czy też operatora jednostkowego *I*. Aby sens powyższego wzoru stał się w pełni jasny, możemy go zapisać następująco:

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle I$$

Rozkład prawdopodobieństwa dla $\bar{\mathbf{A}}$ wygląda tak samo jak rozkład dla **A**, nie licząc przesunięcia powodującego, że średnia wartość $\bar{\mathbf{A}}$ jest równa zeru. Wektory własne $\bar{\mathbf{A}}$ pokrywają się precyzyjnie z tymi **A**, a odpowiednie wartości własne są przesunięte tak, by ich średnia wynosiła zero. Inaczej mówiąc, wartości własne $\bar{\mathbf{A}}$ to

$$\bar{a} = a - \langle \mathbf{A} \rangle$$

Kwadrat nieoznaczoności (czy odchylenia standardowego), oznaczany $(\Delta \mathbf{A})^2$, określa równość

$$(\Delta \mathbf{A})^2 = \sum_a \bar{a}^2 P(a)$$

(5.3)

którą można też zapisać w postaci

$$(\Delta \mathbf{A})^2 = \sum_a \left(a - \langle \mathbf{A} \rangle\right)^2 P(a)$$

(5.4)

Jeszcze inaczej można ją wyrazić jako

$$(\Delta \mathbf{A})^2 = \langle \Psi | \bar{\mathbf{A}}^2 | \Psi \rangle$$

Jeśli wartość oczekiwana **A** jest równa zeru, to nieoznaczoność $\Delta\mathbf{A}$ przybiera prostszą postać

$$(\Delta\mathbf{A})^2 = \langle\Psi|\mathbf{A}^2|\Psi\rangle$$

Inaczej mówiąc, kwadrat nieoznaczoności jest wtedy równy średniej wartości operatora $\mathbf{A}^2$.

5.5 NIERÓWNOŚĆ CAUCHY'EGO–SCHWARZA

Zasada nieoznaczoności to nierówność mówiąca, że iloczyn nieoznaczoności obserwabli **A** i **B** jest większy od pewnej wielkości związanej z ich komutatorem. Opiera się ona na fundamentalnej nierówności matematycznej, będącej po prostu dobrze znaną nierównością trójkąta. Ta ostatnia mówi, że w dowolnej przestrzeni wektorowej długość każdego z boków trójkąta jest mniejsza od sumy długości dwóch pozostałych boków. Dla rzeczywistych przestrzeni wektorowych nierówność

$$|X||Y| \geq |X \cdot Y|$$

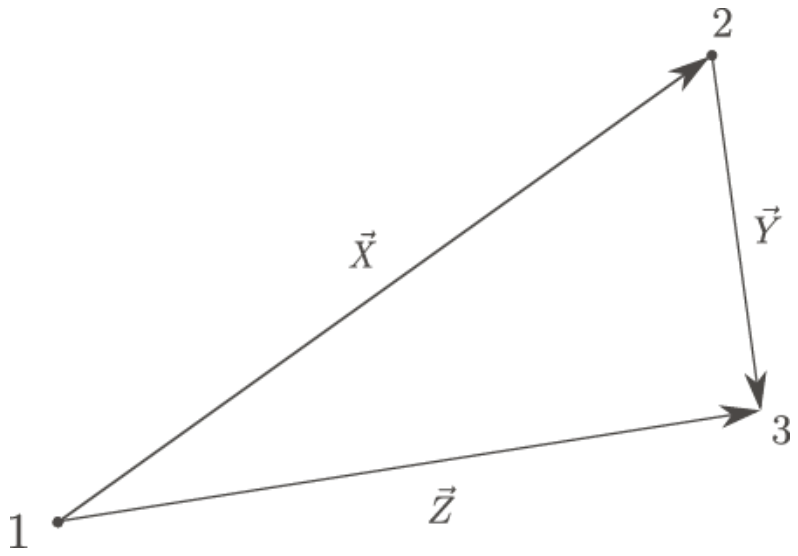
(5.5)

wyprowadzamy więc z nierówności trójkąta

$$|X| + |Y| \geq |X + Y|$$

5.6 NIERÓWNOŚĆ TRÓJKĄTA I NIERÓWNOŚĆ CAUCHY'EGO–SCHWARZA

Nierówność trójkąta pochodzi oczywiście od własności zwykłych trójkątów, ale tak naprawdę jest dużo ogólniejsza i stosuje się do szerszej klasy przestrzeni wektorowych. Fundamentalną ideę przedstawia ilustracja 5.1, na której boki trójkąta są pokazane jako zwykłe geometryczne wektory na płaszczyźnie. Nierówność trójkąta mówi, że suma długości dwóch boków jest większa od długości pozostałego boku i bierze się po prostu z faktu, że najkrótsza droga łącząca dwa punkty prowadzi po linii prostej. Najkrótsza droga między punktami 1 i 3 to bok *Z*, a więc suma długości dwóch pozostałych boków z pewnością będzie większa od długości *Z*.



Ilustracja 5.1. Nierówność trójkąta. Suma długości wektorów $\vec{X}$ i $\vec{Y}$ jest większa bądź równa długości wektora $\vec{Z}$ (najkrótsza ścieżka łącząca dwa dane punkty to linia prosta).

Nierówność trójkąta można wyrazić na wiele sposobów. Zaczniemy od podstawowej definicji, a następnie przekształcimy ją do potrzebnej nam postaci. Wiemy, że prawdziwa jest nierówność

$$|X|+|Y|\geq|Z|$$

Jeśli pomyślimy o *X* i *Y* jako o wektorach, które można do siebie dodać, możemy zapisać ostatnią nierówność jako

$$\left|\vec{X}\right|+\left|\vec{Y}\right|\geq\left|\vec{X}+\vec{Y}\right|$$

Jeśli podniesiemy obie strony do kwadratu, dostaniemy

$$\left|\vec{X}\right|^2+\left|\vec{Y}\right|^2+2\left|\vec{X}\right|\left|\vec{Y}\right|\geq\left|\vec{X}+\vec{Y}\right|^2$$

Prawą stronę można jednak rozwinąć do postaci

$$\left|\vec{X}+\vec{Y}\right|^2=\left|\vec{X}\right|^2+\left|\vec{Y}\right|^2+2\left(\vec{X}\cdot\vec{Y}\right)$$

Dlaczego? Dlatego że $\left|\vec{X}+\vec{Y}\right|^2$ to po prostu $\left(\vec{X}+\vec{Y}\right)\cdot\left(\vec{X}+\vec{Y}\right)$. Zebrawszy te wyniki, otrzymujemy

$$\left|\vec{X}\right|^2+\left|\vec{Y}\right|^2+2\left|\vec{X}\right|\left|\vec{Y}\right|\geq\left|\vec{X}\right|^2+\left|\vec{Y}\right|^2+2\left(\vec{X}\cdot\vec{Y}\right)$$

Teraz wystarczy odjąć od obu stron $\left|\vec{X}\right|^2+\left|\vec{Y}\right|^2$, a następnie podzielić je przez 2, by dostać

$$\left|\vec{X}\right|\left|\vec{Y}\right|\geq\vec{X}\cdot\vec{Y}$$

(5.6)

To inna postać nierówności trójkąta. Mówi nam, że dla dowolnych wektorów $\vec{X}$ i $\vec{Y}$ iloczyn ich długości jest nie mniejszy niż ich iloczyn skalarny. Nie powinno nas to zaskakiwać – iloczyn skalarny definiuje się często jako

$$\vec{X}\cdot\vec{Y}=\left|\vec{X}\right|\left|\vec{Y}\right|\cos\theta$$

gdzie θ to kąt między rozważanymi wektorami. Wiemy jednak, że cosinus kąta przyjmuje wartości między –1 a 1, a więc prawa strona nie może przekroczyć $\left|\vec{X}\right|\left|\vec{Y}\right|$. Ta relacja pozostaje prawdziwa dla wektorów w dwóch wymiarach, w trzech wymiarach, w dowolnej ich liczbie, a nawet dla wektorów w zespolonych przestrzeniach wektorowych. Tak naprawdę jest prawdziwa dla wektorów w każdej przestrzeni wektorowej, pod warunkiem że zdefiniujemy długość wektora jako pierwiastek jego iloczynu skalarnego ze sobą samym. W dalszym ciągu będziemy korzystać z nierówności 5.6 podniesionej do kwadratu, czyli

$$\left|\vec{X}\right|^2\left|\vec{Y}\right|^2 \geq \left(\vec{X}\cdot\vec{Y}\right)^2$$

albo

$$\left|\vec{X}\right|^2\left|\vec{Y}\right|^2 \geq \left|\vec{X}\cdot\vec{Y}\right|^2$$

(5.7)

W tej postaci nazywamy ją nierównością Cauchy'ego–Schwarza.

W świecie zespolonych przestrzeni wektorowych nierówność trójkąta przybiera nieco bardziej skomplikowany charakter. Załóżmy, że $|X\rangle$ i $|Y\rangle$ są dowolnymi wektorami w zespolonej przestrzeni wektorowej. Długości wektorów $|X\rangle$, $|Y\rangle$ i $|X+Y\rangle$ są odpowiednio równe

$$|X| = \sqrt{\langle X|X\rangle}$$

$$|Y| = \sqrt{\langle Y|Y\rangle}$$

$$|X+Y| = \sqrt{\left(\langle X| + \langle Y|\right)\left(|X\rangle + |Y\rangle\right)}$$

(5.8)

Teraz wykonujemy te same kroki co w przypadku rzeczywistym: piszemy najpierw

$$|X|+|Y|\geq|X+Y|$$

Potem podnosimy wynik do kwadratu i upraszczamy otrzymane wyrażenia:

$$2|X||Y|\geq|\langle X|Y\rangle+\langle Y|X\rangle|$$

(5.9)

To sformułowanie nierówności Cauchy'ego–Schwarza, która zaprowadzi nas do zasady nieoznaczoności. Co ma ona wspólnego z dwoma operatorami **A** i **B**? Zaraz się przekonamy, definiując odpowiednio $|X\rangle$ i $|Y\rangle$.

5.7 OGÓLNA ZASADA NIEOZNACZONOŚCI

Niech $|\Psi\rangle$ będzie pewnym wektorem ket, a **A** i **B** dwiema obserwablami. Zdefiniujmy $|X\rangle$ i $|Y\rangle$ następującymi wzorami:

$$|X\rangle=\mathbf{A}|\Psi\rangle$$

$$|Y\rangle=i\mathbf{B}|\Psi\rangle$$

(5.10)

Zwróć uwagę na *i* pojawiające się w drugiej równości. Wstawmy następnie 5.10 do 5.9:

$$2\sqrt{\langle \mathbf{A}^2 \rangle \langle \mathbf{B}^2 \rangle} \geq \left| \langle \Psi | \mathbf{AB} | \Psi \rangle - \langle \Psi | \mathbf{BA} | \Psi \rangle \right|$$

(5.11)

Znak minusa odpowiada czynnikowi *i* umieszczonemu w drugim z równań 5.10. Korzystając z definicji komutatora, dostajemy

$$2\sqrt{\langle \mathbf{A}^2 \rangle \langle \mathbf{B}^2 \rangle} \geq \left| \langle \Psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \Psi \rangle \right|$$

(5.12)

Przypuśćmy na chwilę, że operatory **A** i **B** mają wartości oczekiwane równe zeru. W takim wypadku $\langle \mathbf{A}^2 \rangle$ jest kwadratem nieoznaczoności **A**, czyli $(\Delta \mathbf{A})^2$, a $\langle \mathbf{B}^2 \rangle$ to po prostu $(\Delta \mathbf{B})^2$. Możemy więc przepisać równanie 5.12 jako

$$\Delta \mathbf{A} \Delta \mathbf{B} \geq \frac{1}{2} \left| \langle \Psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \Psi \rangle \right|$$

(5.13)

Zastanówmy się przez chwilę nad tą nierównością matematyczną. Po lewej stronie widzimy iloczyn nieoznaczoności dwóch obserwabli **A** i **B** w stanie Ψ. Nierówność mówi nam, że iloczyn ten nie może być mniejszy niż wyrażenie po prawej stronie, w którym występuje komutator **A** i **B**. Precyzyjnie mówiąc, iloczyn nieoznaczoności nie może być mniejszy od *połowy modułu wartości oczekiwanej komutatora*. Ogólna zasada nieoznaczoności wyraża ilościowo to, czego się już domyślaliśmy: jeśli komutator **A** i **B** nie jest równy

zeru, to nie można być jednocześnie pewnym co do wartości obydwu obserwabli.

Co dzieje się jednak, gdy wartości oczekiwane **A** i **B** są niezerowe? W takim wypadku wystarczy zdefiniować dwa nowe operatory, odejmując odpowiednie wartości oczekiwane:

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle$$

$$\bar{\mathbf{B}} = \mathbf{B} - \langle \mathbf{B} \rangle$$

a następnie powtórzyć to samo rozumowanie co poprzednio, zastępując **A** i **B** wartością $\bar{\mathbf{A}}$ i $\bar{\mathbf{B}}$. Podane niżej ćwiczenie przedstawia kolejne kroki dowodu.

***

Ćwiczenie 5.2

1) Pokaż, że $\Delta \mathbf{A}^2 = \langle \bar{\mathbf{A}}^2 \rangle$ **i** $\Delta \mathbf{B}^2 = \langle \bar{\mathbf{B}}^2 \rangle$**.**

2) Udowodnij, że $[\bar{\mathbf{A}}, \bar{\mathbf{B}}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]$**.**

3) Wykorzystując te relacje, wykaż, że

$$\Delta \mathbf{A} \Delta \mathbf{B} \geq \frac{1}{2} \left| \langle \Psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \Psi \rangle \right|$$

***

Później, w wykładzie 8, wykorzystamy tę bardzo ogólną wersję zasady nieoznaczoności, by wykazać zasadę nieoznaczoności Heisenberga w jej oryginalnej postaci: *iloczyn nieoznaczoności położenia i pędu cząstki nie może być mniejszy od połowy stałej Plancka.*

24 Czy widzisz, dlaczego tak jest?

WYKŁAD 6

Łączenie układów ze sobą: splątanie

– To całkiem przyjazne miejsce – stwierdza Art. – Poza Minus Jedynką nie spotyka się tu zbyt często odludków.
– Łączenie się w grupki to w barze naturalny odruch. Nie tylko dlatego, że jest tu tak ciasno – odpowiada Lenny. – Pamiętaj tylko o portfelu i nie daj się w nic wplątać.

6.1 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – ILOCZYNY TENSOROWE

6.1.1 Poznajcie Alice i Boba

Ustalenie, w jaki sposób układy łączą się ze sobą, tworząc większe, stanowi istotną część pracy fizyka. Pewnie nie muszę ci wyjaśniać, że atom to zbiór nukleonów i elektronów, z których każdy można badać jako samodzielny układ kwantowy.

Kiedy omawia się układy złożone, łatwo pogubić się w formalnym języku, używając sformułowań typu *układ A* czy *układ B*. Większość fizyków woli prostsze, nieformalne określenia, w wyniku czego *Alice* i *Bob* niemal całkowicie zastąpili *A* i *B*. O Alice i Bobie można myśleć

jako o badaczach dowolnych złożonych układów i zestawów laboratoryjnych. Ich sprzęt i wiedza są ograniczone wyłącznie naszą wyobraźnią, a wszelkie trudne czy niebezpieczne zadania, takie jak choćby wskoczenie do czarnej dziury, wykonują bez najmniejszego sprzeciwu. To prawdziwi superbohaterowie naukowców.

Przypuśćmy, że Alice i Bob dysponują dwoma układami – układem Alice i układem Boba. Układ Alice – niezależnie od tego, jak dokładnie wygląda – opisujemy za pomocą przestrzeni stanów oznaczanej *SA*, a układ Boba – za pomocą przestrzeni stanów *SB*. Powiedzmy, że chcemy połączyć te dwa układy w jeden złożony układ. Zanim przejdziemy do kolejnego kroku, sprecyzujmy, z jakimi układami mamy do czynienia. Układem Alice może być na przykład kwantowomechaniczna moneta o dwóch podstawowych stanach, *O* i *R*. Oczywiście klasyczna moneta może istnieć tylko albo w jednym stanie, albo w drugim, ale moneta kwantowa może znajdować się w superpozycji:

$$\alpha_O \left| O \right\} + \alpha_R \left| R \right\}$$

Zauważyliście pewnie, że wektory ket Alice oznaczyłem w dość nietypowy sposób. Chodzi o to, by odróżnić je od wektorów ket Boba. Nowe oznaczenia mają przypominać nam, że nie możemy dodawać wektorów z przestrzeni Alice, *SA*, do wektorów z przestrzeni Boba, *SB*. Przestrzeń Alice jest dwuwymiarową przestrzenią wektorową, zdefiniowaną przy użyciu dwóch wektorów bazowych, $\left| O \right\}$ i $\left| R \right\}$.

Układ Boba może też dysponować monetą, ale równie dobrze może on być czymś innym. Przypuśćmy, że to kwantowa kostka do gry. Wówczas przestrzeń stanów *SB* będzie sześciowymiarowa, a wektory z jej bazy możemy oznaczyć

$$\left| 1 \right\}$$

$$\left| 2 \right\}$$

$|3\}$

$|4\}$

$|5\}$

$|6\}$

mając na myśli sześć ścianek kostki. Tak samo jak układ Alice, kostka Boba ma charakter kwantowomechaniczny, a jej sześć stanów bazowych może tworzyć superpozycje.

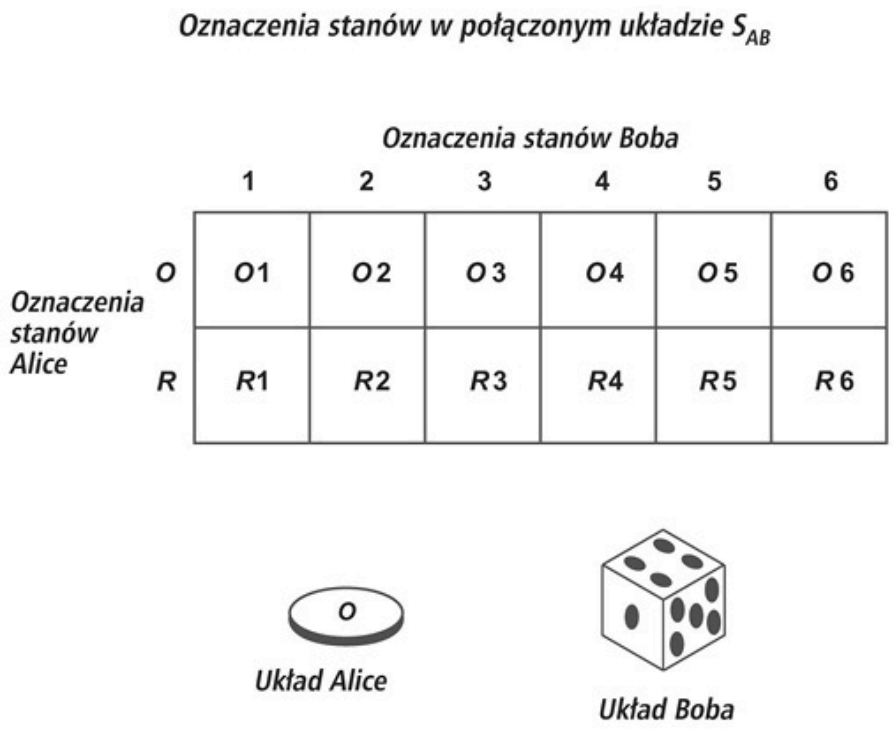
6.1.2 Przedstawianie układów złożonych

Wyobraźmy sobie, że układy Boba i Alice istnieją, a co więcej, tworzą razem pojedynczy, złożony układ. Pierwsze pytanie brzmi wtedy następująco: jak skonstruować przestrzeń stanów – powiedzmy, że oznaczymy ją *SAB* – dla tego złożonego układu? Okazuje się, że należy w tym celu utworzyć *iloczyn tensorowy* przestrzeni *SA* i *SB*. Wynik tej operacji oznaczamy

$$S_{AB} = S_A \otimes S_B$$

Aby zdefiniować przestrzeń *SAB*, wystarczy określić jej wektory bazowe. Są one właśnie takie, jak się spodziewasz. Górna połowa ilustracji 6.1 to tabelka, w której kolumny odpowiadają sześciu wektorom bazowym Boba, a wiersze dwóm wektorom bazowym Alice. Każda kratka w tabelce oznacza wektor bazowy układu *SAB*. I tak na przykład kratka oznaczona *O4* przedstawia stan *SAB*, w którym na monecie widnieje orzeł, a na kostce ścianka 4. W połączonym układzie mamy w sumie dwanaście wektorów bazowych.

Odpowiednie stany można oznaczać na różne sposoby. Stan *O4* da się zapisać *explicite*, czyli jawnie, jako $|O\rangle \otimes |4\rangle$ czy $|O\rangle|4\rangle$. Zwykle wygodniej jest używać połączonego symbolu $|O4\rangle$. Pozwala to podkreślić, że mówimy o pojedynczym stanie oznaczonym symbolem złożonym z dwóch części. Lewa połowa symbolu mówi o podukładzie Alice, a prawa o podukładzie Boba. Notacja, którą nazwaliśmy jawną, i ta z połączonymi symbolami nie różnią się znaczeniem – obie odnoszą się do tego samego stanu.



Ilustracja 6.1: Stany bazowe układu złożonego SAB, przedstawione w tabeli. U góry widać oznaczenia stanów kostki Boba, po lewej zaś oznaczenia stanów monety Alice. Oznaczenia stanów połączonego układu są umieszczone w kratkach tabeli. Każde oznaczenie stanów połączonego układu zawiera w sobie stan każdego z podukładów. Na przykład O4 oznacza stan, w którym na monecie Alice widnieje orzeł, a na kostce Boba 4.

Kiedy już wypisze się wektory bazowe – w tym wypadku będzie ich dwanaście – można je łączyć w kombinacje liniowe, tworząc dowolne

superpozycje. Przestrzeń iloczynu tensorowego jest więc wówczas dwunastowymiarowa. Superpozycja dwóch wektorów bazowych wygląda na przykład tak:

$$\alpha_{h3}\left|O3\right\rangle + \alpha_{t4}\left|R4\right\rangle$$

Za każdym razem pierwsza połowa symbolu stanu opisuje stan monety Alice, a druga stan kostki Boba.

Czasami będziemy musieli się odwoływać do dowolnego wektora bazowego w *SAB*. Wykorzystamy do tego wektory ket wyglądające tak:

$$\left|ab\right\rangle$$

albo tak:

$$\left|a'b'\right\rangle$$

W obu tych zapisach *a* czy *a′* (czy też dowolny inny symbol pojawiający się po lewej stronie oznaczenia) przedstawia jeden ze stanów Alice, *b* czy *b′* – jeden ze stanów Boba.

Kiedy używamy takich oznaczeń, musimy zwrócić uwagę na jedną rzecz. Chociaż nasze symbole na stany w *SAB* mają dwa indeksy, wektory ket takie jak $\left|ab\right\rangle$ czy $\left|O3\right\rangle$ reprezentują *pojedyncze stany* w układzie złożonym. Inaczej mówiąc, używamy dwóch indeksów do oznaczenia pojedynczego stanu. Przyzwyczajenie się do tego zabierze ci trochę czasu. Część symbolu odpowiadająca układowi Alice będzie zawsze pojawiać się po lewej stronie, a ta związana z układem Boba po prawej – to, że Alice i Bob występują w kolejności alfabetycznej, powinno ułatwić ci zapamiętanie tej konwencji.

Te same reguły obowiązują dla ogólniejszych układów. Jedyna różnica polega na tym, że zamiast dwóch A-stanów i sześciu B-

stanów będziemy mieli wtedy odpowiednio N_A i N_B stanów, a iloczyn tensorowy będzie miał wymiar

$$N_{AB} = N_A N_B.$$

Układy o trzech lub więcej składowych można przedstawić jako iloczyny tensorowe trzech lub więcej przestrzeni stanów, ale nie będziemy się tym zajmować w naszej książce.

Teraz, kiedy opisaliśmy już zarówno osobne przestrzenie Alice i Boba, S_A i S_B, jak i połączoną przestrzeń S_{AB}, musimy wprowadzić jeszcze jedno oznaczenie. Alice dysponuje pewnym zbiorem operatorów działających na jej układ, zapisywanych jako σ. Podobnie Bob dysponuje pewnymi operatorami, które będziemy oznaczać τ, aby nie pomylić ich z operatorami Alice. Alice może mieć kilka różnych operatorów σ, a Bob – kilka różnych operatorów τ. Po tych uwagach jesteśmy już gotowi do rozpoczęcia dogłębniejszych badań układów złożonych. Później, w wykładzie 7, wyjaśnimy, jak wyrażać operatory na iloczynie tensorowym w języku składowych, jako macierze działające na wektory kolumnowe.

Na tym etapie lektury naszej książki powinniście już dobrze rozumieć, że fizyka kwantowa różni się od fizyki klasycznej nawet na poziomie podstaw logicznych. W tym i w następnym wykładzie przedstawiane różnice staną się jeszcze bardziej uderzające. Omówimy w nich pewien aspekt fizyki kwantowej, który jest tak krańcowo odmienny od fizyki klasycznej, że – kiedy powstawała ta książka – zastanawiał i irytował fizyków i filozofów już przez blisko osiemdziesiąt lat. Spowodował on, że jego odkrywca, Einstein, doszedł do wniosku, iż fizyce kwantowej brakuje czegoś fundamentalnego. Fizycy wciąż dyskutują nad tym problemem. Einstein zdał sobie sprawę, że akceptując fizykę kwantową, zgadzamy się patrzeć na rzeczywistość w sposób radykalnie różniący się od klasycznego punktu widzenia.

6.2 KLASYCZNE KORELACJE

Zanim zabierzemy się do omawiania splątania kwantowego, poświęcimy trochę czasu na przyjrzenie się koncepcji, którą można nazwać splątaniem klasycznym. W przedstawionym niżej eksperymencie Alice (A) i Bob (B) skorzystają z pomocy Charliego (C).

Charlie trzyma w dłoniach dwie monety: jednocentówkę i dziesięciocentówkę. Miesza je ze sobą, a następnie wręcza po jednej Alice i Bobowi. Nikt nie zerka na przekazane monety i nikt nie wie, kto dostał którą. Następnie Alice wsiada na wahadłowiec lecący do Alfy Centauri, a Bob zostaje w Palo Alto. Charlie wykonał swoje zadanie i przestaje nas obchodzić (przykro nam, Charlie).

Zanim Alice wyruszy na wyprawę, razem z Bobem synchronizują zegarki – wiedzą wystarczająco dużo o teorii względności, biorą więc pod uwagę dylatację czasu i inne podobne zjawiska. Uzgadniają, że Alice spojrzy na swoją monetę sekundę czy dwie przed tym, zanim Bob zerknie na swoją.

Podróż przebiega bezproblemowo i kiedy Alice dociera do Alfy Centauri, faktycznie spogląda na swoją monetę. W tej samej chwili dowiaduje się precyzyjnie, jaką monetę zobaczy Bob, choć ten jeszcze nie sprawdził, co dostał od Charliego. Czy to nie fascynujące? A nawet szalone? Czy Alice i Bobowi udało się złamać fundamentalną regułę teorii względności, mówiącą, że żadna informacja nie może podróżować z prędkością większą od prędkości światła?

Rzecz jasna, nie. Podstawy teorii względności naruszałaby dopiero możliwość, że obserwacja Alice pozwoliłaby jej *natychmiast* przekazać Bobowi informację o tym, czego powinien się spodziewać. Nawet jeśli Alice dowie się, jaką monetę zobaczy Bob, nie będzie potrafiła w żaden sposób dać mu o tym znać – o ile nie wyśle mu z Alfy Centauri rzeczywistej wiadomości, która z pewnością nie dotrze do niego przed upływem czterech lat, tyle bowiem potrzeba światłu na pokonanie dzielącego naszych bohaterów dystansu.

Powtórzmy ten eksperyment wielokrotnie, albo na wielu parach Alice–Bob, albo na tej samej parze, ale w różnych momentach. Aby

móc opisać wyniki ilościowo, Charlie (wrócił już, przyjmując uprzednio nasze przeprosiny) maluje na każdej jednocentówce napis „σ = +1”, a na każdej dziesięciocentówce napis „σ = –1”. Jeśli założymy, że Charlie naprawdę przydziela monety losowo, przekonamy się o następujących faktach:

- Średnio rzecz biorąc, każde z pary A i B dostanie tyle samo jednocentówek co dziesięciocentówek. Oznaczając wyniki obserwacji A przez σ_A, a wyniki obserwacji B przez σ_B, możemy wyrazić to stwierdzenie matematycznie następująco:

$$\langle \sigma_A \rangle = 0$$

$$\langle \sigma_B \rangle = 0$$

(6.1)

- Jeśli A i B zanotują swoje obserwacje, a potem wrócą do Palo Alto, by porównać zapiski, zauważą silną korelację[25]. Za każdym razem, jeśli A zaobserwowała σ_A = +1, to B zaobserwował σ_B = –1, i na odwrót. Inaczej mówiąc, iloczyn $\sigma_A \, \sigma_B$ jest stale równy –1:

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle = -1$$

Zauważ, że średnia wartość iloczynów (σ_A i σ_B) nie jest równa iloczynowi średnich – równanie 6.1 mówi nam, że $\langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle$ jest równy zeru. Symbolicznie zapisujemy to tak:

$$\langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle \neq \langle \sigma_A \sigma_B \rangle$$

albo tak

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle - \langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle \neq 0$$

(6.2)

Ostatnia nierówność pokazuje, że obserwacje Alice i Boba są ze sobą *skorelowane*. Tak naprawdę wielkość

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle - \langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle$$

nazywa się korelacją statystyczną między obserwacjami Boba i Alice. Nazwy tej używamy nawet wtedy, gdy wartość odpowiedniego wyrażenia to zero. Kiedy jest różna od zera, mówimy, że obserwacje są ze sobą skorelowane. W naszym przykładzie źródłem korelacji jest to, że Alice i Bob początkowo przebywali w tym samym miejscu, a Charlie miał po jednej monecie każdego rodzaju. Korelacje przetrwały podróż Alice do Alfy Centauri, bo monety nie zamieniły się w jej trakcie miejscami. Ani w tym fakcie, ani w nierówności 6.2 nie ma nic dziwnego. To często spotykana cecha rozkładów prawdopodobieństwa.

Przypuśćmy, że mamy do czynienia z rozkładem prawdopodobieństwa $P(a,b)$ związanym z dwiema zmiennymi, a i b. Jeśli zmienne są całkowicie nieskorelowane, to prawdopodobieństwo będzie wyrażać się jako iloczyn:

$$P(a,b) = P_A(a)\, P_B(b),$$

6.3)

gdzie $P_A(a)$ i $P_B(b)$ to prawdopodobieństwa odpowiadające pojedynczym zmiennym a i b (indeksy dolne dołączone do oznaczeń funkcji prawdopodobieństwa mają ci przypominać, że funkcje te mogą zależeć na różne sposoby od swoich argumentów). Nietrudno się przekonać, że jeśli prawdopodobieństwo rozkłada się tak na pojedyncze czynniki, to nie występują żadne korelacje; inaczej mówiąc, średnia iloczynu jest równa iloczynowi średnich.

***

Ćwiczenie 6.1. Udowodnij, że jeśli *P*(*a,b*) rozkłada się na czynniki, to korelacja między *a* i *b* jest równa zeru.

***

Zilustruję teraz sytuację, która prowadzi do prawdopodobieństwa rozkładającego się na czynniki na konkretnym przykładzie. Przypuśćmy, że zamiast jednego Charliego mamy dwóch – Charliego A i Charliego B, którzy nigdy się ze sobą nie komunikują. Charlie B wybiera losowo jedną ze swoich dwóch monet i przekazuje ją Bobowi. Drugą po prostu wyrzuca.

Charlie A robi to samo, z tym że wylosowaną monetę wręcza Alice. W takiej sytuacji mamy do czynienia z ogólnym prawdopodobieństwem rozkładającym się na iloczyn prawdopodobieństw, a korelacje nie występują.

W fizyce klasycznej wykorzystujemy statystykę i teorię prawdopodobieństwa, gdy nie wiemy czegoś, o czym teoretycznie rzecz biorąc, moglibyśmy się dowiedzieć. I tak na przykład w pierwszym omawianym eksperymencie Charlie mógłby przeprowadzić delikatną obserwację (szybkie zerknięcie), a dopiero potem przekazać monety Bobowi i Alice. Nie miałoby to żadnego wpływu na ostateczny wynik. W mechanice klasycznej rozkład prawdopodobieństwa *P*(*a,b*) przedstawia niepełne określenie stanu układu. Nie wiemy wszystkiego o układzie – moglibyśmy dowiedzieć się więcej. W fizyce klasycznej stosowanie prawdopodobieństw zawsze wiąże się z niekompletnością wiedzy w porównaniu z całością tego, czego teoretycznie można się dowiedzieć.

Łatwo skojarzyć to ze stwierdzeniem, że posiadanie pełni wiedzy o jakimś układzie w fizyce klasycznej oznacza, iż posiada się też pełną wiedzę o każdej części tego układu. Uznanie, że Charlie wiedział wszystko, czego można się dowiedzieć o układzie złożonym z dwóch monet, a brakowało mu informacji o każdej monecie z osobna, nie miałoby sensu.

Te klasyczne koncepcje są głęboko osadzone w naszym sposobie myślenia. Stanowią podstawę naszego instynktownego rozumienia fizycznego świata i bardzo trudno się ich pozbyć. A jednak musimy to zrobić, aby zrozumieć świat kwantowy.

6.3 ŁĄCZENIE UKŁADÓW KWANTOWYCH ZE SOBĄ

Dwie monety Charliego tworzyły pojedynczy układ klasyczny, złożony z dwóch klasycznych podukładów. Mechanika kwantowa też pozwala nam łączyć układy ze sobą, jak przekonaliśmy się w interludium matematycznym dotyczącym iloczynów tensorowych (w rozdziale 6.1).

Alice i Bob uprzejmie zgodzili się udostępnić nową wersję układu złożonego z kostki/monety, który wypożyczyli nam na czas interludium dotyczącego iloczynów tensorowych. Nowy układ składa się z dwóch spinów zamiast monety i kostki, co oznacza, że przy jego badaniu będziemy mogli wykorzystać wszystko to, czego się już dowiedzieliśmy o pojedynczych spinach.

Tak jak przedtem, będziemy czasem używać dziwacznego oznaczenia $|a\}$, które będzie nam przypominać, że wektory stanu Alice nie należą do tej samej przestrzeni stanów co wektory Boba, a więc nie możemy ich do siebie dodawać. Równocześnie pamiętajmy, że możemy wybrać taką bazę ortonormalną S_{AB}, by każdy jej element dało się oznaczać dwoma wektorami, jednym z S_A, a drugim z S_B. W związku z tym pojedyncze wektory bazowe dla układu złożonego będziemy często zapisywać jako $|a\,b\}$. Takie podwójnie indeksowane wektory bazowe *można* do siebie dodawać i będziemy to robić bardzo regularnie.

Jak wyjaśniliśmy w interludium, przyzwyczajenie się do oznaczania każdego z wektorów bazowych parą indeksów wymaga trochę czasu. Powinniśmy myśleć o parze *ab* jako pojedynczym indeksie odpowiadającym pojedynczemu stanowi.

Przyjrzyjmy się teraz przykładowi. Rozważmy pewien operator liniowy **M** działający na przestrzeni stanów układu złożonego. Zazwyczaj można go przedstawić jako macierz. Odpowiednie elementy macierzowe konstruuje się przez wstawianie operatora pomiędzy wektory bazowe. Wobec tego elementy macierzowe **M** wyrażają się wzorami:

$$\langle a'b'|\mathbf{M}|ab\rangle = M_{a'b',ab}$$

Każdy z wierszy naszej macierzy oznaczamy pojedynczym indeksem (*a'b'*) pochodzącym z układu złożonego, a każdą kolumnę indeksem (*ab*).

Wektory $|ab\rangle$ są ortonormalne, co oznacza, że iloczyny skalarne między nimi są równe zeru, jeśli tylko obydwa indeksy nie są identyczne. Nie oznacza to, że *a* miałoby być identyczne z *b*, ale raczej że *ab* ma być identyczne z *a'b'*. Odpowiedni fakt możemy zapisać, używając do tego symbolu delty Kroneckera:

$$\langle ab|a'b'\rangle = \sigma_{aa'}\sigma_{bb'}$$

Prawa strona jest równa zeru, chyba że *a* = *a′* i *b* = *b′*. Jeśli indeksy się pokrywają, to iloczyn skalarny wynosi 1.

Teraz, kiedy dysponujemy już wektorami bazowymi, dopuszczamy też ich dowolne superpozycje liniowe. Tak więc dowolny stan układu złożonego ma rozwinięcie postaci:

$$|\Psi\rangle = \sum_{a,b}\psi(a,b)|ab\rangle$$

6.4 DWA SPINY

Wracając do naszego eksperymentu, pomyślmy o dwóch spinach należących do Alice i Boba. Aby łatwiej je sobie wyobrazić, załóżmy, że są związane z dwiema cząstkami, umieszczonymi w dwóch niezbyt odległych od siebie, ale różnych punktach przestrzeni.

Zarówno Alice, jak i Bob mają swoje instrumenty pomiarowe, które będziemy nazywać po prostu A i B. Mogą ich używać do przygotowywania stanów oraz do pomiaru składowych spinu. Obydwa można, niezależnie od siebie, ustawić wzdłuż dowolnej osi przestrzennej. Przydadzą się nam nazwy dla obu spinów. Kiedy mieliśmy tylko jeden spin, nazywaliśmy go po prostu σ. Miał on oczywiście trzy składowe odpowiadające osiom x, y i z. Teraz pracujemy z dwoma spinami i warto się zastanowić, jak je oznaczyć, nie używając przy tym zbyt wielu kłopotliwych górnych i dolnych indeksów. Moglibyśmy nazwać je σ^A i σ^B, ich składowe zaś $\sigma^A{}_x$, $\sigma^B{}_y$ i tak dalej. Z mojego punktu widzenia to jednak zbyt wiele indeksów, by o nich pamiętać, zwłaszcza jeśli pisze się na tablicy. W związku z tym użyję raczej konwencji, która pojawiła się już w interludium dotyczącym iloczynów tensorowych. Nazwę spin Alice σ, a spinowi Boba przyporządkuję następną literę w greckim alfabecie, τ. Pełny zestaw składowych dla spinów Alice i Boba to wobec tego

$$\sigma_x,\ \sigma_y,\ \sigma_z$$

oraz

$$\tau_x,\ \tau_y,\ \tau_z.$$

Zgodnie z regułami, które omówiliśmy wcześniej, przestrzeń stanów dla układu składającego się z dwóch spinów to iloczyn tensorowy. Tak samo jak zrobiliśmy to w interludium, możemy wypisać tabelę odpowiednich czterech stanów. Tym razem będzie ona rozmiaru 2 na 2 i pojawią się w niej cztery stany bazowe.

Będziemy pracować z bazą, w której określone są składowe z obydwu spinów. Wektory bazowe to wówczas

$$|gg\rangle, |gd\rangle, |dg\rangle, |dd\rangle$$

W powyższych oznaczeniach pierwsza część odpowiada stanowi *σ*, a druga stanowi *τ*. I tak na przykład pierwszy wektor bazowy $|gg\rangle$ przedstawia stan, w którym obydwa spiny są skierowane do góry. Wektor $|dg\rangle$ zaś to stan, w którym spin Alice jest skierowany w dół, a Boba do góry.

6.5 STANY PRODUKTOWE

Najprostszy rodzaj stanów w układach złożonych to *stany produktowe*. Stan produktowy powstaje w wyniku całkowicie niezależnego przygotowania stanów przez Alice i Boba, w trakcie którego każde z nich używa swojego instrumentu, by przygotować spin. Opiszemy to na konkretnym przykładzie: przypuśćmy, że Alice przygotowuje swój spin w stanie

$$\alpha_g |g\} + \alpha_d |d\}$$

a Bob swój w stanie

$$\beta_g |g\} + \beta_d |d\}$$

Zakładamy, że każdy z tych stanów jest znormalizowany:

$$\alpha_g^* \alpha_g + \alpha_d^* \alpha_d = 1$$

$$\beta_g^* \beta_g + \beta_d^* \beta_d = 1$$

(6.4)

Okazuje się, że takie równania odpowiadające osobnym normalizacjom odgrywają kluczową rolę w definiowaniu stanów produktowych. Gdyby nie zachodziły, stany produktowe nie mogłyby istnieć. Stan produktowy opisujący układ złożony to:

$$|\text{stan produktowy}\rangle = \{\alpha_g |g\} + \alpha_d |d\}\} \otimes \{\beta_g |g\} + \beta_d |d\}\}$$

gdzie pierwszy czynnik odpowiada stanowi Alice, a drugi stanowi Boba. Rozwinięcie iloczynu i przejście do notacji złożonej sprawia, że prawa strona przybiera postać

$$\alpha_g \beta_g |gg\rangle + \alpha_d \beta_d |gd\rangle + \alpha_d \beta_g |dg\rangle + \alpha_d \beta_d |dd\rangle$$

(6.5)

Główną, charakterystyczną cechą stanów produktowych jest to, że podukłady zachowują się w sposób niezależny od siebie. Jeśli Bob przeprowadzi doświadczenie na swoim podukładzie, to otrzymany przez niego wynik będzie dokładnie taki, jak gdyby układu Alice po prostu nie było. Tak samo oczywiście będzie dla Alice.

***

Ćwiczenie 6.2. Pokaż, że jeśli zachodzą dwa warunki normalizacyjne dane równaniami 6.2, to wektor stanu pojawiający się w równaniu 6.5 też jest automatycznie znormalizowany. Inaczej mówiąc, wykaż, że dla tego stanu produktowego normalizacja łącznego wektora stanu nie nakłada żadnych dodatkowych ograniczeń na *α* i *β*.

***

Chciałbym podkreślić, że iloczyny tensorowe i stany produktowe to dwa różne pojęcia, choć występują w podobnym kontekście[26]. Iloczyn tensorowy to *przestrzeń wektorowa* używana przy studiowaniu układów złożonych. Stan produktowy to *wektor stanu*, jeden z wielu wektorów stanu należących do przestrzeni produktowej (przestrzeni iloczynu tensorowego). Jak się wkrótce przekonamy, zdecydowana większość wektorów stanu w przestrzeni produktowej to nie stany produktowe.

6.6 ZLICZANIE PARAMETRÓW DLA STANÓW PRODUKTOWYCH

Rozważmy liczbę parametrów koniecznych do opisania stanu produktowego. Do opisu każdego czynnika potrzeba dwóch liczb zespolonych (α_g i α_d dla Alice, β_g i β_d dla Boba), a więc w sumie mamy do czynienia z czterema liczbami zespolonymi, co odpowiada ośmiu parametrom rzeczywistym. Przypomnijmy jednak, że warunki normalizacyjne z równań 6.4 redukują tę liczbę o dwa. Co więcej, ogólna faza każdego ze stanów nie ma znaczenia fizycznego, a więc ostateczna liczba rzeczywistych parametrów to 4. Nie powinno to być zaskoczeniem: do opisu stanu pojedynczego spinu potrzebowaliśmy dwóch parametrów, a więc dwa niezależne spiny wymagają czterech.

6.7 STANY SPLĄTANE

Reguły mechaniki kwantowej pozwalają nam budować superpozycje wektorów bazowych, tak by powstawały stany ogólniejsze od stanów produktowych. Najogólniejsza możliwa postać wektora w przestrzeni stanów naszego złożonego układu to

$$\psi_{gg}|gg\rangle+\psi_{gd}|gd\rangle+\psi_{dg}|dg\rangle+\psi_{dd}|dd\rangle$$

gdzie tym razem to udekorowane indeksami dolnymi symbole ψ (a nie α i β) oznaczają współczynniki zespolone. Znów mamy do czynienia z czterema liczbami zespolonymi, ale tym razem jest tylko jeden warunek normalizacyjny:

$$\psi_{gg}^{*}\psi_{gg}+\psi_{gd}^{*}\psi_{gd}+\psi_{dg}^{*}\psi_{dg}+\psi_{dd}^{*}\psi_{dd}=1$$

i tylko jedna wspólna faza, której wpływ należy zignorować. Dochodzimy więc do wniosku, że w najogólniejszym wypadku stan układu składającego się z dwóch spinów zależy od sześciu parametrów rzeczywistych. Wynika z tego jasno, że przestrzeń stanów jest bogatsza od zbioru stanów produktowych, które mogą być przygotowane niezależnie przez Boba i Alice. Natknęliśmy się na jakieś nowe zjawisko. Nazywa się je *splątaniem*.

Splątanie nie ma charakteru zero–jedynkowego. Niektóre stany są splątane bardziej niż inne. Przedstawimy teraz przykład stanu maksymalnie możliwie splątanego. Nazywa się go stanem *singletowym*, a wygląda on następująco:

$$|\mathrm{sing}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|gd\rangle-|dg\rangle)$$

Stanu singletowego nie da się zapisać jako stanu produktowego. Tak samo jest dla stanów *trypletowych*,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|gd\rangle+|dg\rangle)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|gg\rangle+|dd\rangle)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|gg\rangle-|dd\rangle)$$

które też są maksymalnie splątane. Powody, dla których nazywa się je stanami singletowym i trypletowym, wyjaśnimy później.

***

Ćwiczenie 6.3. Udowodnij, że stanu $|\mathrm{sing}\rangle$ nie da się zapisać w postaci stanu produktowego.

***

Co właściwie jest tak fascynującego w stanach maksymalnie splątanych? Można to wyrazić w dwóch stwierdzeniach:

- Stan splątany daje kompletny opis układu złożonego. Niczego więcej nie można się o takim układzie dowiedzieć.
- W stanie maksymalnie splątanym nie wiadomo zupełnie nic o pojedynczych podukładach.

Jak to możliwe? Jak zrozumieć to, że wiemy *tyle, ile tylko da się dowiedzieć* o układzie Alice–Bob składającym się z dwóch spinów, a jednocześnVie nie wiemy *nic* o pojedynczych podukładach? Na tym polega tajemnica splątania. Mam nadzieję, że przed końcem wykładu zrozumiesz zasady rządzącej tym zjawiskiem gry, chociaż fundamentalna natura splątania pozostaje wciąż paradoksalna.

6.8 OBSERWABLE ALICE I BOBA

Na razie omówiliśmy przestrzeń stanów dla układu Alice–Bob składającego się z dwóch spinów, ale nie powiedzieliśmy nic o ich obserwablach. Niektóre z nich mają dość oczywisty charakter, nawet jeśli ich matematyczne przedstawienie może być niebanalne. W szczególności Alice i Bob mogą, korzystając z instrumentów A i B, mierzyć składowe swoich spinów:

$$\sigma_x,\ \sigma_y,\ \sigma_z$$

oraz

$$\tau_x,\ \tau_y,\ \tau_z.$$

Jak przedstawić te obserwable jako operatory hermitowskie na przestrzeni stanów układu złożonego? Odpowiedź jest prosta. Operatory Boba działają na stany spinowe Boba tak, jak działałyby, gdyby Alice w ogóle nie było. To samo dzieje się u Alice. Przypomnijmy, jak w istocie działają operatory spinu na stany związane z pojedynczym spinem. Najpierw przyjrzyjmy się spinom Alice:

$$\sigma_z|g\} = |g\}$$

$$\sigma_z|d\} = -|d\}$$

$$\sigma_x|g\} = |d\}$$

$$\sigma_x|d\} = |g\}$$

$$\sigma_y|g\} = i|d\}$$

$$\sigma_y|d\} = -i|g\}$$

(6.6)

Oczywiście układ Boba nie różni się niczym od układu Alice, możemy więc zapisać analogiczny zestaw równań pokazujący, jak składowe τ działają na stany Boba:

$$\tau_z|g\rangle = |g\rangle$$

$$\tau_z|d\rangle = -|d\rangle$$

$$\tau_x|g\rangle = |d\rangle$$

$$\tau_x|d\rangle = |g\rangle$$

$$\tau_y|g\rangle = i|d\rangle$$

$$\tau_y|d\rangle = -i|g\rangle$$

(6.7)

Teraz zastanówmy się, jak zdefiniować działanie odpowiednich operatorów na stany produktowe, $|gg\rangle$, $|gd\rangle$, $|dg\rangle$ i $|dd\rangle$. Okazuje się, że przy działaniu σ kompletnie nieistotna jest ta połowa oznaczeń stanów, która wiąże się z Bobem. Istnieje wiele możliwych kombinacji operatorów i stanów, tu wybiorę losowo i przedstawię tylko kilka z nich. Możesz sam spróbować wypisać wyniki pozostałych działań albo sprawdzić je w dodatku na końcu książki. Zaczynając od operatorów Alice, przekonujemy się, że

$$\sigma_z|gg\rangle = |gg\rangle$$

$$\sigma_z|dg\rangle = -|dg\rangle$$

$$\sigma_x|gd\rangle = |dd\rangle$$

$$\sigma_x|dd\rangle = |gd\rangle$$

$$\sigma_y \left| gg \right\rangle = i \left| dg \right\rangle$$

$$\sigma_y \left| dg \right\rangle = -i \left| gg \right\rangle$$

$$\tau_z \left| gg \right\rangle = \left| gg \right\rangle$$

$$\tau_z \left| dg \right\rangle = \left| dg \right\rangle$$

$$\tau_x \left| gd \right\rangle = \left| gg \right\rangle$$

$$\tau_x \left| dg \right\rangle = \left| dd \right\rangle$$

$$\tau_y \left| gg \right\rangle = i \left| gd \right\rangle$$

$$\tau_y \left| dd \right\rangle = -i \left| dg \right\rangle$$

(6.8)

Znów ogólna zasada mówi, że składowe spinu należące do Alice działają wyłącznie na tę połowę złożonego układu, która jest z Alice związana. Połowa Boba staje się biernym widzem, który w ogóle się nie angażuje. Symbolicznie widać to następująco: gdy działają σ_x, σ_y, czy σ_z, połowa stanu spinowego należąca do Boba się nie zmienia. A kiedy działają operatory spinu τ związane z Bobem, podobnie bierna jest połowa stanu Alice.

Nasze oznaczenia nie są do końca precyzyjne. Wektory w iloczynie tensorowym to *nowe* wektory, zbudowane z wektorów należących do dwóch mniejszych przestrzeni. Technicznie rzecz biorąc, to samo dotyczy operatorów. Jeśli chcielibyśmy być pedantyczni, to nalegalibyśmy na zapisywanie wersji σ_z i τ_x dla iloczynu tensorowego jako odpowiednio $\sigma_z \otimes I$ i $I \otimes \tau_x$, gdzie I to operator identycznościowy.

Okazuje się, że dwie istotne własności iloczynu tensorowego operatorów można podkreślić, przepisując równanie

$$\sigma_z |dg\rangle = -|dg\rangle$$

(6.9)

w postaci

$$(\sigma_z \otimes I)(|d\rangle \otimes |g\rangle) = (\sigma_z |d\rangle \otimes I |g\rangle)$$

$$= (-|d\rangle \otimes |g\rangle)$$

(6.10)

Stosowana powyżej notacja bywa kłopotliwa i zwykle będziemy używać prostszego języka równania 6.9. Oznaczenia z równania 6.10 sprawiają jednak, że dwa fakty stają się bardzo czytelne:

1. Operator złożony $\sigma_z \otimes I$ działa na wektor złożony $|d\rangle \otimes |g\rangle$, tworząc nowy wektor złożony $-|d\rangle \otimes |g\rangle$.
2. Połowa operatora złożonego związana z Alice (lewa połowa) ma wpływ wyłącznie na jej połowę wektora złożonego. Podobnie połowa operatora związana z Bobem ma wpływ wyłącznie na jego połowę wektora.

O operatorach złożonych powiemy więcej w następnym rozdziale. Później, w wykładzie 7, język równania 6.10 pomoże nam się dowiedzieć, jak pracować z iloczynami tensorowymi w języku składowych.

***

Ćwiczenie 6.4. Wykorzystaj postacie macierzowe operatorów σ_x, σ_y i σ_z oraz wektory kolumnowe odpowiadające $|g\}$ i $|d\}$ do sprawdzenia prawdziwości równania 6.6. Następnie wypisz przy użyciu równań 6.6 i 6.7 pozostałe równania, które nie zostały umieszczone w liście równań 6.8. Zajrzyj do dodatku, by sprawdzić poprawność otrzymanych odpowiedzi.

***

Ćwiczenie 6.5. Udowodnij następujące twierdzenie: kiedy dowolny z operatorów spinu należących do Alice bądź Boba działa na stan produktowy, w wyniku powstaje również stan produktowy. Wykaż, że w stanie produktowym wartość oczekiwana dowolnej składowej $\vec{\sigma}$ czy $\vec{\tau}$ jest taka sama, jaka byłaby w stanach odpowiadających pojedynczym spinom.

***

Ostatnie ćwiczenie mówi nam coś ważnego o stanach produktowych. W stanie produktowym każde przewidywanie dotyczące połowy układu należącej do Boba jest takie samo, jakie byłoby w odpowiedniej teorii pojedynczego spinu. Podobnie wygląda sytuacja Alice.

Jeden z przykładów takiej własności stanów produktowych wiąże się z *regułą polaryzacji spinu* omówioną w wykładzie 3. Można ją sformułować następująco:

Dla dowolnego stanu pojedynczego spinu istnieje kierunek, dla którego spin jest równy +1.

Jak już wyjaśniłem, oznacza to, że wartości średnie składowych spełniają równanie

$$\langle\sigma_x\rangle^2+\langle\sigma_y\rangle^2+\langle\sigma_z\rangle^2=1$$

(6.11)

mówiące nam, że nie wszystkie wartości średnie mogą być jednocześnie równe zeru. Tak samo jest dla stanów produktowych. Inaczej wygląda sytuacja dla stanu splątanego, $|\text{sing}\rangle$. Tak naprawdę dla stanu $|\text{sing}\rangle$ prawa strona równania 6.11 okazuje się równa zeru, co zaraz wykażemy.

Przypomnijmy, że stan splątany $|\text{sing}\rangle$ zdefiniowaliśmy wzorem

$$|\text{sing}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|gd\rangle-|dg\rangle)$$

i przyjrzyjmy się wartościom oczekiwanym σ w tym stanie. Dysponujemy już wszystkimi narzędziami potrzebnymi do ich policzenia. Rozważmy najpierw $\langle\sigma_z\rangle$:

$$\langle\sigma_z\rangle=\langle\text{sing}|\sigma_z|\text{sing}\rangle$$

$$=\langle\text{sing}|\sigma_z\frac{1}{\sqrt{2}}(|gd\rangle-|dg\rangle)$$

Właśnie tutaj przydadzą się nam równania 6.8 (oraz ćwiczenie 6.4, które kompletuje odpowiedni zestaw równań!). Mówią one nam, jak σ_Z działa na każdy z wektorów bazowych. W wyniku otrzymujemy

$$\langle\text{sing}|\sigma_z|\text{sing}\rangle=\langle\text{sing}|\frac{1}{\sqrt{2}}(|gd\rangle+|dg\rangle)$$

czyli

$$\langle \sigma_z \rangle = \frac{1}{2}(|gd\rangle - |dg\rangle)(|gd\rangle + |dg\rangle)$$

Szybkie sprawdzenie pozwala stwierdzić, że wyrażenie po prawej stronie jest równe zeru. Rozważmy więc teraz $\langle \sigma_x \rangle$:

$$\langle \sigma_x \rangle = \langle \text{sing} | \sigma_x | \text{sing} \rangle$$

$$= \langle \text{sing} | \sigma_x \frac{1}{\sqrt{2}}(|gd\rangle - |dg\rangle)$$

czyli

$$\langle \sigma_x \rangle = \frac{1}{2}(\langle gd| - \langle dg|)(|dd\rangle - |gg\rangle)$$

Znów otrzymujemy zero. Zostało jeszcze tylko zbadanie $\langle \sigma_y \rangle$:

$$\langle \sigma_y \rangle = \langle \text{sing} | \sigma_y | \text{sing} \rangle$$

$$= \frac{1}{2}(\langle gd| - \langle dg|)(i|dd\rangle + i|gg\rangle)$$

Jak się już pewnie domyśliłeś, kolejny raz dostajemy w wyniku zero. Pokazaliśmy zatem, że dla stanu $|\text{sing}\rangle$

$$\langle \sigma_z \rangle = \langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_y \rangle = 0$$

a więc faktycznie wszystkie wartości oczekiwane σ są równe zeru. Pewnie nie trzeba nawet wspominać, że tak samo jest dla wartości średnich τ. Ewidentnie $|\text{sing}\rangle$ to stan bardzo istotnie różniący się od stanu produktowego. Co mówi nam to wszystko o możliwych do

wykonania pomiarach? Jeśli wartość oczekiwana pewnej składowej σ wynosi zero, to wynik odpowiedniego eksperymentu z jednakowym prawdopodobieństwem będzie równy +1 i –1. Inaczej mówiąc, wyniku nie da się w żadnym stopniu przewidzieć. Chociaż znamy precyzyjnie wektor stanu, $|\mathrm{sing}\rangle$, nie umiemy zupełnie nic powiedzieć o wyniku żadnego pomiaru żadnej ze składowych któregokolwiek spinu.

Być może oznacza to, że stan $|\mathrm{sing}\rangle$ jest w jakimś sensie niekompletny – że są jakieś drobne własności rozważanego układu, których przez naszą niestaranność nie zdołaliśmy zmierzyć. W końcu już wcześniej spotkaliśmy idealnie klasyczny przykład, w którym Alice i Bob nie wiedzieli nic o swoich monetach dopóty, dopóki na nie nie spojrzeli. Czym różni się wersja kwantowa?

W przykładzie ze „splątaniem klasycznym", angażującym Alice, Boba i Charliego, fakt, że można było dowiedzieć się czegoś więcej, jest zupełnie oczywisty. Charlie mógł rzucić okiem na monety, nic przy tym nie zmieniając, ponieważ klasyczne pomiary mogą być dowolnie delikatne.

Czy w układzie kwantowym mogą występować tak zwane *zmienne ukryte*? Odpowiedź na to pytanie brzmi następująco: według reguł mechaniki kwantowej nie istnieją żadne informacje, które można poznać, nie licząc tych zawartych w wektorze stanu, czyli w rozważanym przykładzie w wektorze $|\mathrm{sing}\rangle$. Wektor stanu stanowi najpełniejszy możliwy opis układu. Wygląda więc na to, że w mechanice kwantowej można wiedzieć wszystko o stanie układu złożonego – a przynajmniej wszystko, czego da się dowiedzieć – i nadal nie wiedzieć nic o jego składnikach. Na tym polega głęboka dziwaczność splątania, która tak bardzo dręczyła Einsteina.

6.9 OBSERWABLE ZŁOŻONE

Wyobraźmy sobie teraz kwantowomechaniczną wersję zespołu Alice–Bob–Charlie. Rolą Charliego jest tym razem przygotowanie dwóch

spinów w stanie splątanym $|\mathrm{sing}\rangle$. Następnie, bez zerkania na spiny (pamiętaj, kwantowe pomiary *nie* są delikatne), daje on jeden ze spinów Alice, a drugi Bobowi. Chociaż Alice i Bob dokładnie wiedzą, w jakim stanie znajduje się układ złożony, nie potrafią w żaden sposób przewidzieć wyników swoich indywidualnie przeprowadzanych pomiarów.

Wydaje się jednak, że precyzyjna wiedza o stanie układu musi im *coś* mówić nawet wtedy, kiedy chodzi o stan wysoce splątany. Faktycznie tak jest, ale aby zrozumieć, czym to *coś* jest, musimy rozważyć szerszą rodzinę obserwabli niż te, które Alice i Bob umieją zmierzyć niezależnie od siebie, używając do tego wyłącznie własnych detektorów. Okazuje się, że pewne obserwable można zmierzyć, tylko jeśli zastosuje się obydwa detektory. Alice i Bob mogą poznać wyniki związanych z nimi eksperymentów jedynie wtedy, gdy spotkają się i porównają zapiski.

Przede wszystkim powinniśmy spytać, czy Alice i Bob mogą jednocześnie zmierzyć własne obserwable. Przekonaliśmy się już wcześniej, że istnieją wielkości, których nie da się naraz zmierzyć. W szczególności jeśli dwie obserwable nie komutują ze sobą, to nie da się ich jednocześnie zmierzyć, tak by pomiary wzajemnie na siebie nie wpływały. W wypadku Alice i Boba jednak łatwo sprawdzić, że każda składowa σ komutuje z każdą składową τ.

To ogólny fakt dotyczący iloczynów tensorowych: operatory działające na każdy z oddzielnych podukładów komutują ze sobą. Alice może więc wykonać dowolny pomiar na swoim spinie, a Bob dowolny pomiar na swoim, i żadne z nich nie wpłynie w żaden sposób na wyniki otrzymane przez to drugie.

Przypuśćmy, że Alice mierzy σ_z, Bob mierzy τ_z, a następnie mnożą uzyskane wyniki przez siebie. Inaczej mówiąc, umawiają się, że zmierzą iloczyn $\tau_z \sigma_z$.

Iloczyn $\tau_z \sigma_z$ to obserwabla, którą matematycznie przedstawiamy jako działanie najpierw operatorem σ_z na ket, a następnie zastosowanie operatora τ_z. Pamiętajmy, że mówimy tu tylko o operacjach matematycznych definiujących nowy operator: to nie to samo co wykonywanie pomiarów fizycznych. Do pomnożenia dwóch

operatorów przez siebie nie potrzeba instrumentów pomiarowych, wystarczy ołówek i kartka papieru. Sprawdźmy, co się dzieje, gdy zadziałamy operatorem $\tau_z \sigma_z$ na stan $|\text{sing}\rangle$:

$$\tau_z\sigma_z \frac{1}{\sqrt{2}}(|gd\rangle - |dg\rangle)$$

Najpierw, wykorzystując tabelę równań 6.8, zastosujmy σ_z:

$$\tau_z\sigma_z \frac{1}{\sqrt{2}}(|gd\rangle - |dg\rangle) = \tau_z \frac{1}{\sqrt{2}}(|gd\rangle + |dg\rangle)$$

Następnie zadziałajmy τ_z, dzięki czemu otrzymamy

$$\tau_z\sigma_z \frac{1}{\sqrt{2}}(|gd\rangle - |dg\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|gd\rangle + |dg\rangle)$$

Zauważ, że ostatecznie pojawia się w wyniku znów stan $|\text{sing}\rangle$ pomnożony przez –1:

$$\tau_z\sigma_z |\text{sing}\rangle = -|\text{sing}\rangle$$

Oznacza to, że $|\text{sing}\rangle$ jest wektorem własnym obserwabli $\tau_z \sigma_z$ o wartości własnej –1. Zastanówmy się nad znaczeniem tej obserwacji. Alice mierzy σ_z, a Bob mierzy τ_z; kiedy spotkają się i porównają wyniki, okaże się, że uzyskali przeciwne wartości. Czasami Bob zmierzy +1, a Alice –1. Innym razem Alice dostanie wynik +1, a Bob –1. Iloczyn obu otrzymanych wartości zawsze będzie równy –1.

W tym wniosku nie powinno być nic zaskakującego. Wektor stanu $|\text{sing}\rangle$ to superpozycja dwóch wektorów, $|gd\rangle$ i $|dg\rangle$, z których każdy zawiera dwa spiny o przeciwnych składowych *z*. Cała sytuacja przypomina klasyczny przykład z Charliem i jego dwiema monetami.

Teraz jednak omówimy coś, co nie ma klasycznego odpowiednika. Przypuśćmy, że zamiast mierzyć składowe *z* swoich spinów, Alice i Bob zmierzą składowe *x*. Aby się przekonać, jak skorelowane będą otrzymane przez nich wyniki, musimy przyjrzeć się obserwabli $\tau_x \sigma_x$.

Zadziałajmy tym iloczynem na stan $|\text{sing}\rangle$. Oto kolejne kroki rachunków:

$$\tau_x\sigma_x|\text{sing}\rangle = \tau_x\sigma_x \frac{1}{\sqrt{2}}(|gd\rangle - |dg\rangle)$$

$$= \tau_x \frac{1}{\sqrt{2}}(|dd\rangle - |gg\rangle)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(|dg\rangle - |gd\rangle)$$

czyli po prostu

$$\tau_x\sigma_x|\text{sing}\rangle = -|\text{sing}\rangle$$

Ten wniosek powinien już być nieco zaskakujący: okazuje się, że $|\text{sing}\rangle$ jest też wektorem własnym $\tau_x \sigma_x$ z wartością własną –1. Tym razem znacznie trudniej byłoby się domyślić, że składowe *x* są zawsze przeciwne, gdy się patrzy tylko na postać $|\text{sing}\rangle$. Tak czy inaczej za każdym razem, kiedy Alice i Bob dokonują pomiarów, przekonują się, że σ_x i τ_x przybrały przeciwne wartości. Kiedy już to zaakceptujesz, pewnie nie zdziwi cię, że tak samo będzie dla składowych *y*.

***

Ćwiczenie 6.6. Załóżmy, że Charlie przygotował oba spiny w stanie singletowym. Tym razem Bob mierzy τ_y, a Alice

σ_x. Jaka jest wartość oczekiwana τ_y σ_x? Co mówi nam to o korelacji między tymi dwoma pomiarami?

***

Ćwiczenie 6.7. Tym razem Charlie przygotowuje spiny w innym stanie, oznaczanym $|T_1\rangle$, gdzie

$$|T_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|gd\rangle + |dg\rangle)$$

W tych przykładach T oznacza *tryplet*. Stany trypletowe są krańcowo różne od stanów opisywanych w przykładzie z monetą i kostką. Jakie są wartości oczekiwane operatorów σ_z τ_z, σ_x τ_x i σ_y τ_y?

Jak dużo może zależeć od znaku!

***

Ćwiczenie 6.8. Wykonaj analogiczne obliczenia dla pozostałych dwóch splątanych stanów trypletowych,

$$|T_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|gg\rangle + |dd\rangle)$$

$$|T_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|gg\rangle - |dd\rangle)$$

i zinterpretuj otrzymane wyniki.

***

Rozważmy wreszcie jeszcze jedną obserwablę. Alice i Bob nie mogą zmierzyć jej, wykonując osobne pomiary przy użyciu swoich instrumentów, nawet jeśli spotkają się i porównają uzyskane wyniki. Mimo to zasady mechaniki kwantowej mówią, że da się zbudować jakiś instrument, który pozwoliłby ją pomierzyć.

Obserwabla, o której mowa, to nieformalnie rzecz biorąc zwykły iloczyn skalarny operatorów wektorowych $\vec{\sigma}$ i $\vec{\tau}$:

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau} = \sigma_x \tau_x + \sigma_y \tau_y + \sigma_z \tau_z$$

Można pomyśleć, że aby znaleźć wartość tej obserwabli, wystarczy, by Bob zmierzył wszystkie składowe τ, a Alice wszystkie składowe σ; potem mogliby po prostu pomnożyć odpowiednie składowe przez siebie i dodać otrzymane iloczyny. Problem leży w tym, że Bob nie zdoła jednocześnie zmierzyć pojedynczych składowych τ, gdyż nie komutują one ze sobą. Podobnie Alice może zmierzyć co najwyżej jedną ze składowych σ. Aby zmierzyć $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$, należy zbudować nowy instrument, który pozwoli wyznaczyć wartość $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$ bez mierzenia pojedynczych składowych. Wymyślenie, jak to zrobić, wydaje się dość skomplikowane. Podamy teraz jeden ze sposobów, w jaki można by wykonać taki pomiar. Niektóre atomy mają spiny, które można opisać tak samo jak spiny elektronów. Kiedy dwa takie atomy znajdą się blisko siebie – na przykład jako sąsiedzi w sieci krystalicznej – związany z nimi hamiltonian będzie zależał od spinów. W pewnych układach hamiltonian sąsiadujących spinów jest proporcjonalny do $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$. Wówczas pomiar $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$ jest równoważny pomiarowi energii pary atomów. Ten ostatni to pojedynczy pomiar złożonego operatora, który nie wymaga pomiaru pojedynczych składowych żadnego ze spinów.

***

Ćwiczenie 6.9. Udowodnij, że cztery wektory $|\mathrm{sing}\rangle$, $|T_1\rangle$, $|T_2\rangle$ i $|T_3\rangle$ są wektorami własnymi $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}$. Jakie są odpowiadające

im wartości własne?

***

Przyjrzyj się wynikom otrzymanym w ostatnim ćwiczeniu. Czy widzisz już, dlaczego jeden z tych wektorów stanu nazywa się singletowym, a trzy pozostałe trypletowymi? Chodzi po prostu o to, że kiedy zbada się ich związek z operatorem $\vec{\sigma}\cdot\vec{\tau}$, okazuje się, iż singlet to pojedynczy wektor własny jednej z wartości własnych, a stany trypletowe to wektory własne dla drugiej, *zdegenerowanej* wartości własnej.

Następne ćwiczenie łączy ideę splątania z koncepcją zmiany stanów w czasie przedstawioną w wykładzie 4. Wykorzystaj je, by przypomnieć sobie pojęcie unitarnej ewolucji w czasie i sens hamiltonianu.

***

Ćwiczenie 6.10. Załóżmy, że pewien układ składający się z dwóch spinów ma hamiltonian postaci

$$\mathbf{H}=\frac{\omega}{2}\vec{\sigma}\cdot\vec{\tau}$$

Jakie są możliwe energie układu i jak wyglądają wektory własne hamiltonianu?

Przypuśćmy, że układ znajduje się na początku w stanie $|gg\rangle$. W jakim stanie jest w dowolnym późniejszym czasie? Odpowiedz na to samo pytanie dla początkowych stanów $|gd\rangle$, $|dg\rangle$ i $|dd\rangle$.

***

25 Tak naprawdę w tym przykładzie mamy do czynienia z *idealną* korelacją.

26 Czasami zamiast o iloczynie tensorowym będziemy mówić o *przestrzeni iloczynu tensorowego* albo nawet o *przestrzeni produktowej*.

WYKŁAD 7

Bardziej szczegółowo o splątaniu

„U Hilberta" latem 1935 roku:
Przez wahadłowe drzwi do środka wchodzi dwóch marnie ubranych bywalców, pogrążonych w namiętnej dyskusji. Ten z szaloną, siwiejącą czupryną stwierdza:
– Nie, nie zaakceptuję twojej teorii, dopóki nie powiesz mi, co tak naprawdę składa się na fizyczną rzeczywistość.
Drugi rozgląda się dookoła, podnosi ręce w geście wyrażającym zmęczenie i irytację i odzywa się do Arta i Lenny'ego:
– I znów to samo. Składniki fizycznej rzeczywistości, EPR, EPR i EPR. Nie potrafi już o niczym innym myśleć. Albert, daruj sobie tę obsesję i po prostu zaakceptuj fakty.
– Nigdy! Nie zgodzę się na to, że można wiedzieć o czymś absolutnie wszystko, co tylko możliwe, a jednocześnie nie wiedzieć nic o jego składnikach. Niels, to nie ma żadnego sensu.
– Przykro mi, Albert. Świat po prostu tak wygląda, nic się z tym nie da zrobić. Mogę ci najwyżej postawić piwo.

W tym wykładzie przyjrzymy się splątaniu dokładniej. Będą nam do tego potrzebne pewne dodatkowe narzędzia matematyczne. Najpierw dowiemy się, jak pracować z iloczynami tensorowymi przy użyciu konkretnych współrzędnych. Potem wprowadzimy nowy operator, zwany *macierzą gęstości*. Pojęcia, o których mowa, nie są trudne do opanowania, ale posługiwanie się nimi wymaga trochę cierpliwości i wytrwałości w zmaganiu się z indeksami.

7.1 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – ILOCZYNY TENSOROWE W POSTACI ZALEŻNEJ OD KONKRETNYCH WSPÓŁRZĘDNYCH

W wykładzie 6 wyjaśniliśmy, jak utworzyć iloczyn tensorowy dwóch przestrzeni wektorowych, wykorzystując do tego abstrakcyjne pojęcia wektorów bra, ketów i symboli operatorowych takich jak na przykład σ_z. Jak wyrazić tę konstrukcję w języku kolumn, wierszy i macierzy?

Budowanie iloczynów tensorowych przy użyciu macierzy i wektorów kolumnowych nie jest zbyt trudne. Jak się wkrótce przekonamy, odpowiednie reguły są proste. Jedyna komplikacja kryje się w wyjaśnieniu, dlaczego te reguły działają, to znaczy dlaczego pozwalają nam konstruować macierze i wektory kolumnowe mające własności, których od nich oczekujemy. Odpowiemy na to pytanie na dwa różne sposoby. Najpierw zbudujemy operatory złożone przy użyciu sprawdzonych już w praktyce metod przedstawionych w wykładzie 3, a potem pokażemy, jak tworzyć je bezpośrednio z ich operatorowych składowych.

7.1.1 Konstruowanie macierzy będących iloczynami tensorowymi na podstawie fundamentalnych zasad

Już w wykładzie 3 wyjaśniliśmy, jak zapisać dowolną obserwablę **M** w postaci macierzowej względem pewnej konkretnej bazy. Przypomnij sobie teraz tę konstrukcję, zaglądając do równań 3.1–3.4. Obliczyliśmy wtedy wartości liczbowe elementów macierzowych m_{jk} obserwabli **M** przy użyciu wzoru

$$m_{jk} = \langle j | \mathbf{M} | k \rangle$$

(7.1)

gdzie $|j\rangle$ i $|k\rangle$ oznaczały odpowiednie wektory bazowe. Każda z kombinacji $|j\rangle$ i $|k\rangle$ prowadziła do innego elementu macierzowego[27].

Nasz plan polega na zastosowaniu powyższego wzoru do pewnych operatorów na iloczynie tensorowym i sprawdzeniu, co otrzymamy. Z uwagi na używaną przez nas konwencję podwójnego indeksowania wektorów bazowych w iloczynie tensorowym, „obłożenie" obserwabli wektorami będzie tym razem wyglądać nieco inaczej niż w równaniu 7.1. Po każdej z obu stron obserwabli wystąpią kolejno wektory bazowe $|gg\rangle$, $|gd\rangle$, $|dg\rangle$ i $|dd\rangle$[28]. Aby nie komplikować zbytnio rachunków, jako przykładu użyjemy operatora $\sigma_z \otimes I$, gdzie I to operator jednostkowy. Jak już wcześniej widzieliśmy, $\sigma_z \otimes I$ działa na połowę wektora stanu związaną z Alice jak σ_Z, a jego działanie na połowę wektora związaną z Bobem zupełnie nic nie zmienia. Ponieważ pracujemy w czterowymiarowej przestrzeni wektorowej, odpowiednia macierz będzie rozmiaru 4 na 4. Opuszczając liczne symbole $\otimes$, by zwiększyć czytelność zapisu, możemy przedstawić tę macierz następująco:

$$\sigma_z \otimes I =$$

$$\begin{pmatrix} \langle gg|\sigma_z I|gg\rangle & \langle gg|\sigma_z I|gd\rangle & \langle gg|\sigma_z I|dg\rangle & \langle gg|\sigma_z I|dd\rangle \\ \langle gd|\sigma_z I|gg\rangle & \langle gd|\sigma_z I|gd\rangle & \langle gd|\sigma_z I|dg\rangle & \langle gd|\sigma_z I|dd\rangle \\ \langle dg|\sigma_z I|gg\rangle & \langle dg|\sigma_z I|gd\rangle & \langle dg|\sigma_z I|dg\rangle & \langle dg|\sigma_z I|dd\rangle \\ \langle dd|\sigma_z I|gg\rangle & \langle dd|\sigma_z I|gd\rangle & \langle dd|\sigma_z I|dg\rangle & \langle dd|\sigma_z I|dd\rangle \end{pmatrix}$$

(7.2)

Aby obliczyć odpowiednie elementy macierzowe, moglibyśmy wykorzystać działanie operatorów σ_Z i I zarówno na lewą, jak i na prawą stronę. Załóżmy, że σ_Z działa na lewo, a I na prawo. Ponieważ działanie I nie powoduje żadnej zmiany, interesuje nas tylko wynik działania σ_Z na wektor bra po lewej stronie. Pamiętamy, że to działanie tak naprawdę ogranicza się wyłącznie do widniejącego

najbardziej po lewej (a więc odpowiadającego Alice) indeksu stanu. Korzystając z wzorów, które wyprowadziliśmy już wcześniej (zob. równania 6.6–6.7), możemy wykonać odpowiednie rachunki i otrzymać macierz iloczynów skalarnych:

$$\sigma_z \otimes I = \begin{pmatrix} \langle gg|gg\rangle & \langle gg|gd\rangle & \langle gg|dg\rangle & \langle gg|dd\rangle \\ \langle gd|gg\rangle & \langle gd|gd\rangle & \langle gd|dg\rangle & \langle gd|dd\rangle \\ -\langle dg|gg\rangle & -\langle dg|gd\rangle & -\langle dg|dg\rangle & -\langle dg|dd\rangle \\ -\langle dd|gg\rangle & -\langle dd|gd\rangle & -\langle dd|dg\rangle & -\langle dd|dd\rangle \end{pmatrix}$$

(7.3)

Ponieważ widniejące wyżej wektory są ortonormalne, macierz redukuje się do postaci

$$\sigma_z \otimes I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(7.4)

Jak zapisać wektory własne $|gg\rangle$, $|gd\rangle$, $|dg\rangle$ i $|dd\rangle$ jako wektory kolumnowe? Na razie powiem ci tylko, że wektory $|gg\rangle$ i $|dg\rangle$ przedstawimy odpowiednio jako

$$|gg\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |dg\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(7.5)

Zobaczmy, co się dzieje, gdy operator $\sigma_z \otimes I$ działa na wektory kolumnowe. Przyłożenie rozważanej macierzy do wektora $|gg\rangle$ daje

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Inaczej mówiąc,

$$(\sigma_z \otimes I)|gg\rangle = |gg\rangle$$

tak jak należało oczekiwać. Co się stanie, gdy przyłożymy tę samą macierz do wektora kolumnowego $|dg\rangle$ z równań 7.5? Wykonanie mnożenia macierzowego prowadzi, tak jak powinno, do wektora $-|dg\rangle$.

7.1.2 KONSTRUOWANIE MACIERZY BĘDĄCYCH ILOCZYNAMI TENSOROWYMI ZA POMOCĄ ICH MACIERZY SKŁADOWYCH

Opisana wyżej metoda obliczania elementów macierzowych jest bardzo ogólna – działa dla wszystkich obserwabli. Jeśli musimy skonstruować iloczyn tensorowy dwóch operatorów, a znamy już elementy macierzowe obydwu składników iloczynu, to możemy z tej wiedzy skorzystać bezpośrednio. Oto reguła pokazująca, jak łączyć ze sobą macierze 2 na 2, by utworzyć macierz 4 na 4:

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} A_{11}B & A_{12}B \\ A_{21}B & A_{22}B \end{pmatrix}$$

(7.6)

albo

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} A_{11}B_{11} & A_{11}B_{12} & A_{12}B_{11} & A_{12}B_{12} \\ A_{11}B_{21} & A_{11}B_{22} & A_{12}B_{21} & A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} & A_{21}B_{12} & A_{22}B_{11} & A_{22}B_{12} \\ A_{21}B_{21} & A_{21}B_{22} & A_{22}B_{21} & A_{22}B_{22} \end{pmatrix}$$

(7.7)

Analogiczne formuły działają dla macierzy dowolnego rozmiaru. Ten rodzaj mnożenia macierzy nazywa się czasem *iloczynem Kroneckera*. Pojęcie to odnosi się wyłącznie do macierzy – to macierzowa wersja iloczynu tensorowego. Iloczyn Kroneckera dwóch macierzy 2 na 2 to macierz 4 na 4. Dla macierzy wyższych rozmiarów odpowiednie wzory są bardzo podobne. Ogólnie mówiąc, iloczyn Kroneckera macierzy *m* na *n* i macierzy *p* na *q* to macierz *mp* × *nq*.

Wszystko to stosuje się też do wektorów wierszowych czy kolumnowych, które można uważać za szczególnego rodzaju macierze. Iloczyn tensorowy dwóch wektorów kolumnowych 2 na 1 to wektor kolumnowy 4 na 1. Jeśli *a* i *b* są wektorami kolumnowymi 2 na 1, ich iloczyn tensorowy wygląda następująco:

$$\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{11} \\ b_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} \\ a_{11}b_{21} \\ a_{21}b_{11} \\ a_{21}b_{21} \end{pmatrix}$$

(7.8)

Sprawdźmy, co oznacza to dla Alice i Boba. Najpierw skonstruujemy cztery wektory bazowe dla iloczynu tensorowego, używając do tego $|g\rangle$ i $|d\rangle$. Przypomnijmy równania 2.11 i 2.12 z wykładu 2:

$$|g\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Jeśli wstawimy do równania 7.8 odpowiednie kombinacje $|g\rangle$ i $|d\rangle$, okaże się, że nasze wektory kolumnowe o wymiarach 4 na 1 to

$$|gg\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|gd\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|dg\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|dd\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

W kolejnym kroku zastosujemy regułę opisaną równaniem 7.7 do połączenia operatorów σ_z i τ_z. Jeśli wykorzystamy do zdefiniowania macierzy σ_z i τ_z równania 3.20, otrzymamy działającą na iloczynie tensorowym macierz

$$\sigma_z \otimes \tau_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Porównajmy ten wynik z iloczynem σ_x i τ_z:

$$\sigma_x \otimes \tau_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Zauważ, że $\sigma_x \otimes \tau_z$ różni się od $\sigma_z \otimes \tau_x$. Należało się tego spodziewać, te operatory przedstawiają przecież różne obserwable.

Na razie idzie nam nieźle. Teraz napotkamy jednak coś nieco bardziej interesującego. Wykorzystując kilka ćwiczeń, postaramy się przekonać cię, że iloczyn Kroneckera to naprawdę iloczyn tensorowy macierzy – inaczej mówiąc, że połowa macierzy związana z Alice wpływa tylko na jej połowę wektora kolumnowego, i tak samo jest dla Boba. Trudność leży w tym, że iloczyn Kroneckera miesza ze sobą elementy należące do różnych składowych.

Przyjrzyjmy się na przykład działaniu $\sigma_z \otimes \tau_x$ na $|gd\rangle$. Tłumacząc abstrakcyjne symbole na język konkretnych współrzędnych, możemy to działanie zapisać jako

$$(\sigma_z \otimes \tau_x)|gd\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wektor kolumnowy po prawej stronie odpowiada $|gg\rangle$ pojawiającemu się w równaniach 7.9. Jeśli wyrazimy więc ostatni wynik znów w języku abstrakcyjnym, dostaniemy

$$(\sigma_z \otimes \tau_x)|gd\rangle = |gg\rangle$$

Tego właśnie potrzebujemy – macierzowego przedstawienia naszych abstrakcyjnych operatorów i wektorów stanu, które odtworzyłoby ich znane już nam zachowanie.

Pierwsze z poniższych ćwiczeń pomoże nam utrwalić koncepcję mówiącą, że połowa $\sigma \otimes \tau$ związana z σ wpływa wyłącznie na połowę wektora stanu należącą do Alice, a ta związana z τ wpływa jedynie na część wektora należącą do Boba. Kolejne pozwoli nam przećwiczyć znajdowanie elementów macierzowych operatora przy założeniu, że wiemy już, jak operator ten działa na każdy z wektorów bazowych.

***

Ćwiczenie 7.1. Zapisz iloczyn tensorowy $I \otimes \tau_x$ jako macierz i zadziałaj nią na każdy z wektorów kolumnowych $|gg\rangle$, $|gd\rangle$, $|dg\rangle$ i $|dd\rangle$. Pokaż, że za każdym razem połowa wektora stanu związana z Alice pozostaje bez zmian.

Przypomnijmy, że I oznacza macierz jednostkową wymiaru 2 na 2.

***

Ćwiczenie 7.2. Oblicz elementy macierzowe operatora $\sigma_z \otimes \tau_x$, wyznaczając odpowiednie iloczyny skalarne, tak jak zrobiliśmy to w równaniu 7.2.

***

Trzecie ćwiczenie jest nieco pracochłonne, ale powinno wyjaśnić wszystkie wątpliwości. Rozważmy równanie

$$(A \otimes B)(a \otimes b) = (Aa \otimes Bb)$$

(7.10)

Tak jak w równaniach 7.7 i 7.8 *A* i *B* oznaczają macierze (czyli operatory) rozmiaru 2 na 2, a *a* i *b* oznaczają wektory kolumnowe rozmiaru 2 na 1. Ćwiczenie polega na wypisaniu równania 7.10 przy użyciu konkretnych współrzędnych i sprawdzeniu, że lewa strona równa się prawej.

***

Ćwiczenie 7.3

a) Przepisz równanie 7.10, zastępując symbole *A*, *B*, *a* i *b* macierzami i wektorami kolumnowymi z równań 7.7 i 7.8.

b) Wykonaj występujące po prawej stronie mnożenia macierzowe *Aa* i *Bb*. Sprawdź, że w wyniku otrzymałeś macierze rozmiaru 4 na 1.

c) Rozpisz wszystkie trzy iloczyny Kroneckera.

d) Sprawdź, że każdy z iloczynów Kroneckera ma odpowiednią liczbę wierszy i kolumn:

- $A \otimes B$: **4 na 4**
- $a \otimes b$: **4 na 1**
- $Aa \otimes Bb$: **4 na 1**

e) Wykonaj mnożenia macierzowe po lewej stronie, prowadzące do wektora kolumnowego rozmiaru 4 na 1. Każdy z jego wierszy powinien być sumą czterech czynników.

f) Na koniec sprawdź, że otrzymane po obu stronach równania wektory są identyczne.

***

7.2 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – ILOCZYNY ZEWNĘTRZNE[29]

Jeśli mamy do dyspozycji bra $\langle\varphi|$ i ket $|\psi\rangle$, możemy utworzyć za ich pomocą iloczyn skalarny $\langle\varphi|\psi\rangle$. Jak już dobrze wiemy, iloczyn skalarny to liczba zespolona. Istnieje jednak pewien inny rodzaj iloczynu, zwany iloczynem zewnętrznym, zapisywany jako

$$|\psi\rangle\langle\varphi|$$

Iloczyn zewnętrzny nie jest liczbą: to operator liniowy. Przyjrzyjmy się, co się stanie, gdy $|\psi\rangle\langle\varphi|$ zadziała na inny ket:

$$|\psi\rangle\langle\varphi|\ |A\rangle$$

W tych przykładach do oznaczania kolejno wykonywanych operacji nie używamy nawiasów, ale po prostu przerw we wzorze. Przypomnijmy, że wszystkie operacje dotyczące bra, ketów i operatorów liniowych są łączne, a więc możemy łączyć je ze sobą jak tylko nam się podoba, pod warunkiem że zachowujemy tę samą kolejność od lewej do prawej[30]. Działanie operatora będącego iloczynem zewnętrznym jest bardzo proste – można je zdefiniować następująco:

$$|\psi\rangle\langle\varphi|\ |A\rangle \equiv |\psi\rangle\ \langle\varphi|A\rangle$$

Inaczej mówiąc, obliczamy iloczyn skalarny $\langle\varphi|$ z $|A\rangle$ (otrzymując w wyniku liczbę zespoloną) i mnożymy go przez ket $|\psi\rangle$. Notacja bra–ket okazuje się tak skuteczna, że w praktyce zmusza nas do przyjęcia właśnie takiej definicji. W tym właśnie objawia się geniusz Paula Diraca. Łatwo pokazać, że iloczyn zewnętrzny działa również na wektory bra:

$$\langle B|\ |\psi\rangle\langle\varphi| \equiv \langle B|\psi\rangle\ \langle\varphi|$$

Rozważmy szczególny przypadek: iloczyn zewnętrzny ketu z odpowiadającym mu bra, $|\psi\rangle\langle\psi|$. Jeśli dodatkowo wektor $|\psi\rangle$ jest znormalizowany, to otrzymany operator nazywamy *projekcją* albo *rzutowaniem*. Oto jak wygląda jego działanie:

$$|\psi\rangle\langle\psi|\ |A\rangle \equiv |\psi\rangle\ \langle\psi|A\rangle$$

Zauważmy, że wynik jest zawsze proporcjonalny do $|\psi\rangle$. Możemy powiedzieć, że projekcja rzutuje wektor na kierunek wyznaczony przez $|\psi\rangle$. Wypiszemy teraz kilka własności projekcji, które możesz

bez trudu udowodnić (pamiętaj, że wektor $|\psi\rangle$ jest znormalizowany, czyli ma długość 1):

- Projekcje są hermitowskie.
- Wektor $|\psi\rangle$ jest wektorem własnym odpowiadającej mu projekcji, o wartości własnej 1:

$$|\psi\rangle\langle\psi| \ |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

- Dowolny wektor ortogonalny do $|\psi\rangle$ to wektor własny o wartości własnej 0. Tak więc wartości własne $|\psi\rangle\langle\psi|$ to wyłącznie 0 i 1, a 1 odpowiada tylko jeden (z dokładnością do pomnożenia przez liczbę zespoloną) wektor własny. Ten wektor to sam $|\psi\rangle$.
- Kwadrat projekcji jest równy tej samej projekcji:

$$|\psi\rangle\langle\psi|^2 = |\psi\rangle\langle\psi|$$

- *Ślad* operatora (czy dowolnej macierzy kwadratowej) definiuje się jako sumę wyrazów na przekątnej. Jeśli oznaczymy ślad przez *Tr*, to ślad operatora **L** określa się wzorem

$$Tr\ \mathbf{L} = \sum_i \langle i|\mathbf{L}|i\rangle$$

co oznacza dokładnie sumę elementów macierzowych **L** leżących na przekątnej. Ślad projekcji wynosi 1. Wynika to z tego, że ślad operatora hermitowskiego to suma jego wartości własnych[31].

- Jeśli dodamy do siebie wszystkie projekcje odpowiadające wektorom z pewnej bazy, to otrzymamy operator jednostkowy:

$$\sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbf{I}$$

(7.11)

Pozostało nam jeszcze do omówienia jedno bardzo ważne twierdzenie dotyczące projekcji i wartości oczekiwanych. Wartość oczekiwana obserwabli **L** w stanie $|\psi\rangle$ wyraża się wzorem

$$\langle\psi|\mathbf{L}|\psi\rangle = Tr\ |\psi\rangle\langle\psi|\mathbf{L}$$

(7.12)

Oto kolejne kroki prowadzące do dowodu tego faktu. Wybierzmy dowolną bazę $|i\rangle$. Następnie, korzystając z definicji śladu, napiszmy

$$Tr\ |\psi\rangle\langle\psi|\mathbf{L} = \sum_i \langle i|\psi\rangle\langle\psi|\mathbf{L}|i\rangle$$

Obydwa czynniki występujące po znaku sumy to po prostu liczby, możemy więc zamienić je miejscami:

$$Tr\ |\psi\rangle\langle\psi|\mathbf{L} = \sum_i \langle\psi|\mathbf{L}|i\rangle\langle i|\psi\rangle$$

Sumując składniki i wykorzystując równość $\sum|i\rangle\langle i| = I$, otrzymujemy

$$Tr\ |\psi\rangle\langle\psi|\mathbf{L} = \langle\psi|\mathbf{L}|\psi\rangle$$

Wyrażenie po prawej stronie to właśnie wartość oczekiwana **L**.

7.3 MACIERZE GĘSTOŚCI: NOWE NARZĘDZIE

Na razie dowiedzieliśmy się, jak przewidywać, co stanie się z układem, gdy znamy precyzyjnie jego stan kwantowy. W praktyce jednak zwykle nie posiadamy pełnej wiedzy o stanie układu. Przypuśćmy na przykład, że Alice przygotowała spin, używając do

tego instrumentu ustawionego wzdłuż pewnej osi. Następnie przekazuje spin Bobowi, nie mówiąc mu jednak, o jaką oś chodziło. Być może udostępnia mu tylko częściową informację, powiedzmy tłumacząc, że instrument był ustawiony wzdłuż osi *z* lub wzdłuż osi *x*, ale odmawia zdradzenia czegokolwiek więcej. Co może wtedy zrobić Bob? Jak wykorzystać dostępną mu wiedzę, by przewidzieć, jakie będą wyniki jego eksperymentów?

Bob rozumuje następująco: jeśli Alice przygotowała spin w stanie $|\psi\rangle$, to wartość oczekiwana dowolnej obserwabli **L** wynosi

$$Tr\ |\psi\rangle\langle\psi|\mathbf{L} = \langle\psi|\mathbf{L}|\psi\rangle$$

Z kolei jeśli przygotowała spin w stanie $|\varphi\rangle$, to wartość oczekiwana **L** wynosi

$$Tr\ |\varphi\rangle\langle\varphi|\mathbf{L} = \langle\varphi|\mathbf{L}|\varphi\rangle$$

Co się więc dzieje, gdy mamy 50 procent szans na to, że przygotowała stan $|\psi\rangle$, i 50 procent szans na to, że przygotowała $|\varphi\rangle$? Rzecz jasna, wartość oczekiwana jest wtedy równa

$$\langle\mathbf{L}\rangle = \frac{1}{2}Tr\ |\psi\rangle\langle\psi|\mathbf{L} + \frac{1}{2}Tr\ |\varphi\rangle\langle\varphi|\mathbf{L}$$

Jedyne, co robimy, to uśredniamy wynik, uwzględniając niewiedzę Boba dotyczącą stanu przygotowanego przez Alice.

Teraz jednak możemy połączyć oba czynniki w pojedyncze wyrażenie, definiując macierz gęstości ρ, zawierającą kompletną informację o tym, co wie Bob. W omawianym przykładzie macierz gęstości to suma połowy projekcji na $|\varphi\rangle$ oraz połowy projekcji na $|\psi\rangle$:

$$\rho = \frac{1}{2}|\psi\rangle\langle\psi| + \frac{1}{2}|\varphi\rangle\langle\varphi|$$

Zawarliśmy teraz całą wiedzę Boba o układzie w pojedynczym operatorze ρ. Reguła pozwalająca nam obliczać wartości oczekiwane staje się teraz bardzo prosta:

$$\langle \mathbf{L} \rangle = Tr\ \rho \mathbf{L}$$

(7.13)

Możemy to uogólnić. Przypuśćmy, że Alice mówi Bobowi, iż przygotowała jeden z kilku stanów – nazwiemy je $|\varphi_1\rangle$, $|\varphi_2\rangle$, $|\varphi_3\rangle$ i tak dalej. Ponadto określa prawdopodobieństwa $P_1, P_2, P_3 \ldots$ odpowiadające każdemu z tych stanów. Bob nadal może wtedy zawrzeć całą swoją wiedzę w pojedynczej macierzy gęstości:

$$\rho = P_1 |\varphi_1\rangle\langle\varphi_1| + P_2 |\varphi_2\rangle\langle\varphi_2| + P_3 |\varphi_3\rangle\langle\varphi_3| + \ldots$$

Co więcej, wciąż może korzystać z tej samej zasady, opisanej równaniem 7.13, by obliczać wartości oczekiwane.

Kiedy macierz gęstości odpowiada pojedynczemu stanowi, jest projekcją rzutującą właśnie na ten stan. W takim razie mówimy, że mamy do czynienia ze stanem *czystym*. Stan czysty opisuje maksimum wiedzy, jaką Bob może zdobyć o badanym układzie kwantowym. W ogólniejszym przypadku macierz gęstości jest mieszanką kilku projekcji. Mówimy wtedy, że opisuje ona stan *mieszany*.

Korzystałem tu z określenia *macierz gęstości*, ale ściśle rzecz biorąc, ρ to operator. Staje się macierzą dopiero wtedy, gdy wybierzemy jakąś bazę. Przypuśćmy, że wybrano bazę $|a\rangle$. Wówczas macierz gęstości to po prostu macierzowe przedstawienie ρ względem tej bazy:

$$\rho_{aa'} = \langle a | \rho | a' \rangle$$

Jeśli macierzowe przedstawienie **L** to $L_{a',a}$, równanie 7.13 przybiera postać

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_{a,a'} L_{a',a} \rho_{a,a'}$$

(7.14)

7.4 SPLĄTANIE I MACIERZE GĘSTOŚCI

Pojęcia odpowiadające stanom czystym i mieszanym występują też w fizyce klasycznej, choć noszą tam inne nazwy. Aby zilustrować ich rolę, rozważmy układ składający się z dwóch cząstek poruszających się po linii prostej. Według zasad mechaniki klasycznej możemy obliczyć orbity cząstek, jeśli w pewnej chwili znamy wartości ich położeń (x_1 i x_2) oraz pędów (p_1 i p_2). Stan układu wyznaczają więc cztery liczby: x_1, x_2, p_1 i p_2. Jeśli znamy te cztery liczby, dysponujemy tak kompletnym opisem układu składającego się z dwóch cząstek, jak tylko to możliwe: nie sposób dowiedzieć się już niczego więcej. Możemy więc mówić o odpowiednim stanie jako o klasycznym stanie czystym.

Często jednak nie znamy dokładnie stanu, natomiast posiadamy wyłącznie pewne informacje o charakterze probabilistycznym. Można je zawrzeć w gęstości prawdopodobieństwa

$$\rho(x_1, x_2, p_1, p_2)$$

Klasyczny stan czysty to szczególny przykład gęstości prawdopodobieństwa, dla którego ρ jest różna od zera tylko w jednym punkcie. W ogólnym przypadku ρ będzie jednak „rozmyta”, i wtedy nazwiemy ją klasycznym stanem mieszanym[32]. Założenie, że ρ jest rozmyta, oznacza, iż nasza wiedza o stanie

układu jest niekompletna. Im większy jest stopień „rozmycia”, tym mniej wiemy o układzie.

Ten przykład powinien uświadomić nam w jasny sposób jeden fakt: jeśli znamy stan czysty dla układu złożonego z dwóch cząstek, to wiemy wszystko o każdej z nich. Inaczej mówiąc, stan czysty dla dwóch *klasycznych* cząstek zawiera w sobie stany czyste dla każdej z pojedynczych cząstek.

W mechanice kwantowej dla stanów splątanych takie stwierdzenie przestaje być prawdziwe. Stan układu złożonego może być stuprocentowo czysty, podczas gdy każdy z jego składników należy opisywać stanem mieszanym.

Rozważmy układ złożony z dwóch części, *A* i *B*. Może chodzić o dwa spiny, albo o jakikolwiek układ złożony. Założymy, że Alice ma kompletną wiedzę o stanie pełnego układu. Inaczej mówiąc, zna funkcję falową

$$\psi(a,b)$$

Jej wiedzy o stanie układu złożonego niczego nie brakuje. Przypuśćmy jednak, że Alice w ogóle nie obchodzi część *B*. Zależy jej na tym, żeby dowiedzieć się jak najwięcej o *A* bez przyglądania się *B*. Wybiera więc obserwablę **L**, która jest związana z *A* i której działanie nie zmienia stanu *B*. Reguła opisująca sposób obliczania wartości oczekiwanej **L** to

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_{ab,a'b'} \psi^*(a'b') L_{a'b',ab} \psi(ab)$$

(7.15)

Na razie opisywana sytuacja jest całkowicie ogólna. Jeśli jednak obserwabla **L** jest związana wyłącznie z *A*, to działa trywialnie na indeksy *b* i wartość oczekiwaną można zapisać jako

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_{a,b,a'} \psi^*(a'b) L_{a',a} \psi(ab)$$

(7.16)

Wobec tego Alice może zawrzeć całą swoją wiedzę dotyczącą części *A* w języku macierzy gęstości ρ:

$$\rho_{aa'} = \sum_{b} \psi^*(a'b) \psi(ab)$$

(7.17)

Widzimy tu coś zaskakującego: równanie 7.16 ma taką samą postać jak równanie 7.14 opisujące wartości oczekiwane dla stanu mieszanego. Ściśle mówiąc, ρ przybierze postać pojedynczej projekcji tylko w szczególnym przypadku, gdy mamy do czynienia ze stanem produktowym. Innymi słowy, przekonaliśmy się, że chociaż układ złożony opisuje stan idealnie czysty, jego podukład *A* trzeba opisywać stanem mieszanym.

Warto zwrócić uwagę na pewną subtelność występującą w naszych oznaczeniach macierzy gęstości: w równaniu 7.17 „prawy” indeks ρ odpowiada sprzężeniu zespolonemu wektora stanu $\Psi^*(a'b)$ występującego w sumowaniu. Wynika to z przyjętej przez nas konwencji

$$L_{aa'} = \langle a | \mathbf{L} | a' \rangle$$

oznaczania elementów macierzowych operatora **L**. Zastosowanie tej konwencji do operatora

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$$

daje

$$\rho_{aa'} = \langle a|\Psi\rangle\langle\Psi|a'\rangle$$

czyli

$$\rho_{aa'} = \psi(a)\psi^*(a')$$

7.5 SPLĄTANIE DLA DWÓCH SPINÓW

Zanim zagłębimy się dalej w świat splątania, podam prostą definicję i zaproponuję ci na rozgrzewkę krótkie ćwiczenie. Jeśli Alice dysponuje wyłącznie jednym spinem, którego stan zna, jej macierz gęstości określamy wzorem

$$\rho_{aa'} = \psi^*(a')\psi(a)$$

Powyższe równanie mówi nam, jak obliczać elementy macierzy gęstości Alice. Jeśli pozostaniemy przy dobrze już nam znanej bazie σ_z, każdy z indeksów a i a' może przybrać wartość „do góry" lub „w dół", a więc macierz gęstości Alice jest macierzą 2 na 2.

***

Ćwiczenie 7.4. Oblicz macierz gęstości dla

$$|\Psi\rangle = \alpha|g\rangle + \beta|d\rangle$$

Odpowiedź to:

$$\psi(g) = \alpha; \quad \psi^*(g) = \alpha^*$$

$$\psi(d) = \beta; \quad \psi^*(d) = \beta^*$$

$$\rho_{a'a} = \begin{pmatrix} \alpha^*\alpha & \alpha^*\beta \\ \beta^*\alpha & \beta^*\beta \end{pmatrix}$$

<u>Spróbuj teraz podstawić w miejsce α i β konkretne liczby, pamiętając o warunku znormalizowania do 1. Możesz spróbować na przykład</u>

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \ , \ \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

***

Ten prosty przykład powinien pozwolić ci zrozumieć własności macierzy gęstości. Możesz znów do niego zajrzeć, kiedy będziemy badać bardziej złożony przykład stanu splątanego.

Przypuśćmy, że znamy funkcję falową układu złożonego, powiedzmy równą

$$\Psi(a,b)$$

ale interesuje nas wyłącznie podukład Alice. Inaczej mówiąc, chcemy wiedzieć o wszystkim, co może zmierzyć Alice. Czy musimy znać w tym celu całą funkcję falową? Czy istnieje jakiś sposób, by pozbyć się zmiennych Boba? Odpowiedź na ostatnie pytanie okazuje się pozytywna: możemy podać pełny opis podukładu Alice w języku macierzy gęstości *ρ*.

Rozważmy obserwablę **L** związaną z układem Alice. Podobnie jak każdą inną obserwablę, można ją przedstawić jako macierz:

$$L_{a'b',ab} = \langle a'b' | \mathbf{L} | ab \rangle$$

Pamiętaj, że w układach złożonych para *ab* jest tak naprawdę pojedynczym indeksem odpowiadającym wektorowi bazowemu.

Kiedy mówimy, że „**L** jest obserwablą związaną z układem Alice”, mamy na myśli to, że **L** nie zmienia nic w części stanu oznaczonej jako należąca do Boba. Wymusza to pewne warunki na postać **L**. Polegają one na tym, by wykreślić (ustalić jako równe zeru) te elementy macierzowe **L**, które wpływałyby w jakikolwiek sposób na część stanu odpowiadającą układowi Boba. Inaczej mówiąc, **L** przybiera szczególną postać

$$L_{a'b',ab} = L_{a'a}\delta_{b'b}$$

(7.18)

To niewinnie wyglądające równanie wymaga pewnego wyjaśnienia. Może ci się do niego przydać powtórzenie materiału dotyczącego operatorów na iloczynie tensorowym w postaci zależnej od konkretnych współrzędnych, zamieszczonego w interludium o iloczynach tensorowych (rozdział 6.1). Po lewej stronie równości występuje element macierzy o rozmiarze 4 na 4. Każdy z jej dwóch indeksów może przybrać jedną z czterech wartości: *gg*, *gd*, *dg* albo *dd*. Co dzieje się po prawej stronie? Element macierzowy $L_{a',a}$ też zależy od dwóch indeksów, ale każdy z nich przybiera tylko jedną z dwóch wartości: *g* albo *d*. Tak naprawdę symbole *L* po obu stronach równania 7.18 oznaczają inne macierze.

Na pierwszy rzut oka może się wydawać, że przyrównaliśmy macierz 4 na 4 do macierzy 2 na 2, co niewątpliwie stanowiłoby problem. Okazuje się jednak, że czynnik $\delta_{b',b}$ rozwiązuje wszystkie kłopoty. Wyraz $L_{a',a}\ \delta_{b',b}$ to element macierzowy iloczynu tensorowego dwóch macierzy 2 na 2, a więc macierzy 4 na 4[33]. Oto właściwy sposób interpretacji równania 7.18:

Macierz $L_{a'\ b',ab}$ wymiaru 4 na 4 można przedstawić jako iloczyn tensorowy dwóch macierzy 2 na 2, $L_{a',a}$ i $\delta_{b',b}$, gdzie $\delta_{b',b}$ odpowiada macierzy jednostkowej 2 na 2.

Obliczmy teraz wartość oczekiwaną **L** (w wersji będącej macierzą 4 na 4), stosując narzędzia do badania układów złożonych, jakie już zdobyliśmy:

$$\langle \Psi | \mathbf{L} | \Psi \rangle = \sum_{a,b,a',b'} \psi^*(a',b') L_{a'b',ab} \psi(a,b)$$

Tak jak ostrzegałem wcześniej, pojawia się tu naprawdę dużo indeksów. Wszystko upraszcza się jednak, jeśli skorzystamy ze szczególnej postaci macierzy *L*. Czynnik $\delta_{b',b}$ w równaniu 7.18 – delta Kroneckera – likwiduje wszystkie elementy, które zmieniałyby część stanu należącą do Boba, a pozostałe pozostawia bez zmian. Mówi nam, że powinniśmy podstawić za *b′* po prostu *b*, co daje

$$\langle \Psi | \mathbf{L} | \Psi \rangle = \sum_{a',b,a} \psi^*(a',b) L_{a',a} \psi(a,b)$$

(7.19)

Zignorujmy przez chwilę sumowanie po indeksach *a* i *a′* i skoncentrujmy się na sumie po indeksie *b*. Zauważymy wtedy wielkość

$$\rho_{a',a} = \sum_b \psi^*(a,b) \psi(a',b)$$

(7.20)

Macierz $\rho_{a',a}$ to macierz gęstości Alice. Zauważ, że macierz $\rho_{a',a}$ nie zależy od żadnego indeksu typu *b*, gdyż sumowanie po *b* zostało już wykonane. Jest wyłącznie funkcją zmiennych Alice, *a* i *a′*. Tak naprawdę jedynym powodem, dla którego pozostawiliśmy w równaniu symbole *b*, jest to, że powinno ci to ułatwić zrozumienie przykładu, który omówimy w następnym rozdziale.

Równanie 7.19 możemy uprościć, wstawiając do niego $\rho_{a',a}$ z równania 7.20. Wartość oczekiwana **L** (wersji rozmiaru 2 na 2) staje się wtedy równa

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_{a'a} \rho_{a'a} L_{a,a'}$$

(7.21)

Sumując po *b*, zredukowaliśmy macierz 4 na 4 do macierzy 2 na 2. Ma to sens – spodziewamy się, że operator działający na układ złożony powinien być macierzą 4 na 4, a operator Alice – macierzą 2 na 2.

Zauważ, że prawa strona równania 7.21 to suma elementów macierzowych występujących na przekątnej. Inaczej mówiąc, jest to ślad macierzy $\rho\mathbf{L}$, co możemy zapisać w postaci

$$\langle \mathbf{L} \rangle = Tr\,\rho\mathbf{L}$$

Wynika z tego następujący wniosek: aby obliczyć ρ, macierz gęstości Alice, możemy potrzebować wiedzy o pełnej funkcji falowej, w tym o jej zależności od zmiennych Boba. Kiedy jednak już poznamy ρ, możemy zapomnieć o jej pochodzeniu i wykorzystać ją do wykonania dowolnych obliczeń dotyczących obserwacji Alice. Spróbujmy na przykład użyć ρ do obliczenia $P(a)$, prawdopodobieństwa tego, że po wykonanym doświadczeniu układ Alice znajdzie się w stanie *a*. Aby wyznaczyć $P(a)$, najpierw obliczamy $P(a,b)$, prawdopodobieństwo tego, że złożony układ znajdzie się w stanie $|ab\rangle$. Jest ono równe po prostu

$$P(a,b) = \psi^*(a,b)\psi(a,b)$$

Zgodnie ze standardowymi regułami prawdopodobieństwa, jeśli wysumujemy ten wynik po *b*, otrzymamy prawdopodobieństwo

odpowiadające *a*:

$$P(a) = \sum_b \psi^*(a,b)\psi(a,b)$$

.

Jest ono równe elementowi macierzy gęstości leżącemu na przekątnej:

$$P(a) = \rho_{aa}$$

(7.22)

Przedstawimy teraz kilka własności macierzy gęstości:

- Macierze gęstości są hermitowskie:

$$\rho_{aa'} = \rho^*_{a'a}$$

- Ślad macierzy gęstości wynosi 1:

$$Tr(\rho) = 1$$

Równanie 7.22 powinno wyjaśnić ten fakt – po jego lewej stronie występuje prawdopodobieństwo.

- Wszystkie wartości własne macierzy gęstości są nieujemne i leżą między 0 a 1. Wynika z tego, że jeśli jakaś wartość własna jest równa 1, to wszystkie inne muszą być równe 0. Czy umiesz podać interpretację tego wyniku?
- Dla stanu czystego mamy

$$\rho^2 = \rho$$

$$Tr(\rho^2) = 1$$

- Dla stanu mieszanego czy splątanego mamy

$$\rho^2 \neq \rho$$

$$Tr\left(\rho^2\right) < 1$$

Ostatnie dwie własności dają nam czytelny sposób matematycznego rozróżnienia między stanami czystymi a mieszanymi. Podukład stanu splątanego (takiego jak połowa stanu singletowego należąca do Alice) uważa się za stan mieszany.

Warto poświęcić trochę czasu na lepsze zrozumienie dwóch ostatnich własności. Aby uprościć rozumowanie, założymy, że ρ to macierz diagonalna – inaczej mówiąc, wszystkie jej wyrazy leżące poza przekątną są równe zeru. To uproszczenie tak naprawdę nic nas nie kosztuje, gdyż ρ jest macierzą hermitowską, a okazuje się, że każdą macierz hermitowską daje się w pewnej bazie przedstawić jako macierz diagonalną[34]. Obliczanie kwadratu macierzy diagonalnej jest dość proste – w tym celu wystarczy podnieść do kwadratu każdy z jej wyrazów. Ponieważ ρ opisuje stan mieszany, a elementy na jej przekątnej muszą w sumie dać 1, żaden z tych elementów nie może być równy 1. Inaczej ρ opisywałaby stan czysty. Okazuje się więc, że ρ musi mieć na przekątnej przynajmniej dwa dodatnie wyrazy mniejsze od 1. Podniesienie ich do kwadratu daje nową macierz ρ^2, której wyrazy będą jeszcze mniejsze. To wyjaśnia obie podane wyżej własności ρ dla stanów mieszanych.

Zanim zabierzesz się do następnych ćwiczeń, chciałbym wspomnieć jeszcze jedną rzecz dotyczącą śladu. Okazuje się, że ma on wiele interesujących własności matematycznych. Jedna z nich mówi, że ślad iloczynu dwóch macierzy nie zależy od kolejności, w jakiej je pomnożymy. Inaczej mówiąc,

$$Tr\ AB\ =\ Tr\ BA$$

nawet jeśli

$$AB \neq BA$$

Wspominam o tym tutaj, bo czasem natrafisz na ślad macierzy gęstości zapisany jako *Tr* **L***ρ*, a nie *Tr ρ***L**. Obydwa wyrażenia są równoważne.

***

Ćwiczenie 7.5

a) Pokaż, że

$$\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & b^2 \end{pmatrix}$$

b) Załóż teraz, że

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

Oblicz

$$\rho^2$$

$$Tr(\rho)$$

$$Tr(\rho^2)$$

c) Jeśli potraktować ρ jako macierz gęstości, to czy opisuje ona stan czysty czy stan mieszany?

***

Ćwiczenie 7.6. Udowodnij za pomocą równania 7.22, że jeśli ρ jest macierzą gęstości, to Tr(ρ) = 1.

***

7.6 KONKRETNY PRZYKŁAD: OBLICZANIE MACIERZY GĘSTOŚCI ALICE

Cała nasza dotychczasowa opowieść o macierzach gęstości mogła się niektórym czytelnikom wydawać zbyt abstrakcyjna. Przedstawimy więc teraz szczegółowo przykład, który powinien dobrze zilustrować koncepcję macierzy gęstości. Przypomnijmy definicję macierzy gęstości Alice podaną w równaniu 7.20:

$$\rho_{a',a} = \sum_b \psi^*(a,b)\psi(a',b)$$

(7.23)

a następnie rozważmy wektor stanu

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|gd\rangle + |dg\rangle\right)$$

Zauważ, że dwa z wektorów bazowych mają współczynniki równe $\frac{1}{\sqrt{2}}$, a dla dwóch pozostałych odpowiednie współczynniki są równe zeru. Stan jest znormalizowany, bo suma współczynników podniesionych do kwadratu wynosi 1. Wszystkie cztery współczynniki są ponadto liczbami rzeczywistymi, a więc operacja wykorzystania sprzężenia zespolonego staje się prostsza.

Obliczmy teraz macierz gęstości Alice dla tego stanu. Po pierwsze wyliczmy dla wszystkich możliwych *a* i *b* wartości *ψ* (*a*, *b*). Przypomnijmy, że to po prostu współczynnik wektorów bazowych:

$$\psi(g,g)=0$$

$$\psi(g,d)=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\psi(d,g)=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\psi(d,d)=0$$

W kolejnym kroku zastosujemy te cztery równania do obliczenia każdego z wyrazów macierzy gęstości Alice, przekształcając odpowiednio sumy z równania 7.23. Zauważ, że w otrzymanym rozwinięciu każdy z czynników postaci $\psi^*(a,b)\psi(a',b)$ zawiera w obu wyrażeniach ten sam indeks związany z Bobem. Czynniki, które nie mają tej własności, po prostu odrzucamy. Odpowiada to formalnemu stwierdzeniu: „w sumowaniu podstawiamy *b′* za *b*". Oto otrzymane rozwinięcie:

$$\rho_{gg}=\psi^*(g,g)\psi(g,g)+\psi^*(g,d)\psi(g,d)=\frac{1}{2}$$

$$\rho_{gd}=\psi^*(g,g)\psi(d,g)+\psi^*(g,d)\psi(d,d)=0$$

$$\rho_{dg}=\psi^*(d,g)\psi(g,g)+\psi^*(d,d)\psi(g,d)=0$$

$$\rho_{dd}=\psi^*(d,g)\psi(d,g)+\psi^*(d,d)\psi(d,d)=\frac{1}{2}$$

Te wartości to wyrazy macierzy 2 na 2:

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

(7.24)

Ślad tej macierzy wynosi 1. I tak dokonało się obliczanie macierzy gęstości[35].

***

Ćwiczenie 7.7. Wykorzystaj równanie 7.24 do obliczenia ρ^2. Dlaczego otrzymany wynik potwierdza, że ρ opisuje stan splątany? Wkrótce przekonamy się, że są też inne sposoby, by dowiedzieć się o splątaniu badanego stanu.

***

Ćwiczenie 7.8. Rozważ następujące stany:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2}\left(|gg\rangle + |gd\rangle + |dg\rangle + |dd\rangle\right)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|gg\rangle + |dd\rangle\right)$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{5}\left(3|gg\rangle + 2|gd\rangle\right)$$

Dla każdego z nich oblicz macierze gęstości Alice i Boba. Zbadaj ich własności.

***

7.7 TESTY NA SPLĄTANIE

Przypuśćmy, że podałbym ci funkcję falową

$$\psi(a, b)$$

dla układu złożonego S_{AB}. Jak moglibyśmy sprawdzić, czy odpowiadający jej stan jest splątany? Nie chodzi mi tu o jakiś test doświadczalny, ale o procedurę matematyczną. Podobne pytanie dotyczy tego, jak zbadać intensywność splątania. Jeśli stany mogą być splątane w różnym stopniu, jak opisać to ilościowo?

Splątanie to kwantowomechaniczne uogólnienie korelacji. Inaczej mówiąc, informuje nas o tym, że Alice może dowiedzieć się czegoś o połowie układu związanego z Bobem, mierząc swój układ. W klasycznym przykładzie podanym w poprzednim wykładzie zilustrowałem koncepcję korelacji przy użyciu monet. Jeśli Alice zaobserwuje monetę, którą dał jej Charlie, nie tylko dowie się, czy jest to jednocentówka czy dziesięciocentówka, dowie się też, jaką monetę ma Bob. Tak wygląda sytuacja eksperymentalna. Matematyczną oznaką występowania korelacji jest to, że funkcja prawdopodobieństwa $P(a,b)$ nie rozkłada się na czynniki (to znaczy nie wygląda tak jak w równaniu 6.3). Za każdym razem, kiedy rozkład prawdopodobieństwa nie wyraża się jako odpowiedni iloczyn, mamy do czynienia z korelacjami niezerowymi, tak jak opisałem to w nierówności 6.2.

7.7.1 TEST NA SPLĄTANIE ZWIĄZANY Z KORELACJAMI

Załóżmy, że **A** to obserwabla związana z Alice, a **B** to obserwabla Boba. Korelację między nimi definiuje się w języku wartości średnich (nazywanych też wartościami oczekiwanymi) pojedynczych obserwabli i ich iloczynu. Przypuśćmy, że te wartości oczekiwane są równe

$$\langle \mathbf{A} \rangle$$

$$\langle \mathbf{B} \rangle$$

$$\langle \mathbf{AB} \rangle.$$

Korelację $C(A,B)$ między **A** i **B** definiujemy wzorem

$$C(A,B) = \langle \mathbf{AB} \rangle - \langle \mathbf{A} \rangle \langle \mathbf{B} \rangle$$

Ćwiczenie 7.9. Wykaż, że jeśli A jest obserwablą Alice, a B obserwablą Boba, to w stanie produktowym korelacja $C(A,B)$ jest równa zeru.

***

Ostatnie ćwiczenie mówi nam coś o splątaniu. Jeśli układ znajduje się w stanie, dla którego można znaleźć dwie obserwable **A** i **B**, i są one skorelowane, czyli takie, że $C(A,B)$ jest dla nich różna od zera, to stan ten musi być splątany. Korelacje zdefiniowaliśmy tak, by leżały między –1 a 1. Te ekstremalne wartości przedstawiają maksymalne możliwe korelacje dodatnie i ujemne. Im większa jest wartość bezwzględna $C(A,B)$, tym bardziej splątany jest stan. Jeśli $C(A,B) = 0$, to korelacja, a wraz z nią i splątanie, nie występują.

7.7.2 TEST NA SPLĄTANIE ZWIĄZANY Z MACIERZĄ GĘSTOŚCI

Aby obliczyć korelacje, musimy dysponować wiedzą zarówno o części układu związanej z Alice, jak i o tej związanej z Bobem, a także funkcją falową całego układu. Istnieje jednak inny test na splątanie, który wymaga od nas wyłącznie znajomości macierzy gęstości Alice (czy też Boba). Przypuśćmy, że stan $|\Psi\rangle$ jest stanem produktowym, powstałym z czynnika Boba, $|\varphi\rangle$, i czynnika Alice, $|\psi\rangle$. Oznacza to, że łączna funkcja falowa też jest iloczynem czynnika związanego z Bobem i związanego z Alice:

$$\psi(a,b) = \psi(a)\varphi(b)$$

Obliczmy teraz macierz gęstości Alice. Jeśli skorzystamy z definicji z równania 7.20, dostaniemy

$$\rho_{a',a} = \psi^*(a)\psi(a')\sum_b \varphi^*(b)\varphi(b)$$

Jeśli jednak stan Boba jest znormalizowany, to

$$\sum_b \varphi^*(b)\varphi(b) = 1$$

co sprawia, że macierz gęstości Alice wygląda szczególnie prosto:

$$\rho_{a',a} = \psi^*(a)\psi(a')$$

(7.25)

Zauważ, że zależy ona tylko od zmiennych Alice. Pewnie nie powinno nas zbytnio dziwić, że wszystko, co potrzebujemy wiedzieć

o układzie Alice, kryje się w jej funkcji falowej.

Teraz udowodnię kluczowe twierdzenie o wartościach własnych macierzy gęstości Alice, przy założeniu, że mamy do czynienia ze stanem produktowym. Jest ono prawdziwe tylko dla stanów, które nie są splątane, a więc można je wykorzystać do ich zidentyfikowania. Wspomniane twierdzenie mówi, że dla każdego stanu produktowego macierz gęstości Alice (czy Boba) ma dokładnie jedną niezerową wartość własną, która jest równa 1. Jego wyprowadzanie zaczniemy od zapisania równania na wartości własne dla macierzy ρ:

$$\sum_a \rho_{a'a}\alpha_a = \lambda\alpha_{a'}$$

Inaczej mówiąc, macierz ρ w działaniu na wektor kolumnowy a daje ten sam wektor pomnożony przez wartość własną λ. Korzystając z prostej postaci macierzy ρ w równaniu 7.25, możemy napisać:

$$\psi(a')\sum_a \psi^*(a)\alpha_a = \lambda\alpha_{a'}$$

(7.26)

Teraz możemy wyciągnąć kilka wniosków. Po pierwsze, wielkość

$$\sum_a \psi^*(a)\alpha_a$$

wygląda jak iloczyn skalarny. Jeśli wektor kolumnowy a jest ortogonalny do ψ, to lewa strona równania 7.26 wynosi zero. Taki wektor to wektor własny macierzy ρ o wartości własnej 0.

Po drugie, jeśli wymiar przestrzeni stanów Alice wynosi N_A, to istnieje $N_A - 1$ niezależnych wektorów o długości 1 prostopadłych do ψ. Każdy z nich to wektor własny ρ o wartości własnej 0. To

pozostawia nam tylko jeden możliwy kierunek dla wektora własnego z niezerową wartością własną, a wektorem tym jest $\psi(a)$. Faktycznie, jeśli wstawimy do równania $\alpha_a = \psi(a)$, to przekonamy się, że jest to wektor własny ρ o wartości własnej 1.

Podsumujmy całe twierdzenie: jeśli układ złożony Alice–Bob znajduje się w stanie produktowym, to macierz gęstości Alice (czy Boba) ma dokładnie jedną wartość własną równą 1, a wszystkie inne jej wartości własne są równe 0. Co więcej, wektor własny odpowiadający wartości własnej 1 to po prostu funkcja falowa połowy układu należącej do Alice.

W takim wypadku układ Alice znajduje się w stanie czystym. Wszystkie jej obserwacje można opisać tak, jak gdyby Bob i jego układ w ogóle nie istnieli, a Alice dysponowała izolowanym układem opisywanym funkcją falową $\psi(a)$.

Idealnym przeciwieństwem stanu czystego jest *stan maksymalnie splątany*. Stany maksymalnie splątane to stany w układach złożonych, dla których nie da się nic powiedzieć o żadnym z osobnych podukładów, choć jednocześnie stanowią one kompletny opis pełnego układu – tak kompletny, jak tylko pozwala na to mechanika kwantowa. Stan $|sing\rangle$ to stan maksymalnie splątany.

Kiedy Alice oblicza swoją macierz gęstości dla stanu maksymalnie splątanego, spotyka ją poważne rozczarowanie. Macierz gęstości okazuje się proporcjonalna do macierzy jednostkowej. Wszystkie wartości własne są sobie równe, a ponieważ w sumie muszą dać 1, każda z nich jest równa $1/N_A$. Inaczej mówiąc,

$$\rho_{a'a} = \frac{1}{N_A}\delta_{a'a}$$

(7.27)

Dlaczego taki wniosek jest dla Alice rozczarowaniem? Przyjrzyj się jeszcze raz równaniu 7.22. Mówi ono, że prawdopodobieństwo wystąpienia konkretnego stanu *a* opisuje element przekątniowy

macierzy ρ. Równanie 7.27 pokazuje z kolei, że wszystkie te prawdopodobieństwa są sobie równe. Co może dawać mniej informacji niż rozkład prawdopodobieństwa tak pozbawiony jakiejkolwiek struktury, że każdy możliwy wynik jest jednakowo prawdopodobny?

Maksymalne splątanie implikuje całkowity brak informacji o podukładzie Alice, gdy chodzi o eksperymenty, które dotyczą wyłącznie jednego podukładu. Równocześnie oznacza ono silne korelacje między pomiarami wykonywanymi przez Alice i Boba. W wypadku stanu singletowego, jeśli Alice zmierzy dowolną składową swojego spinu, to natychmiast dowiaduje się, jaki wynik otrzymałby Bob, gdyby zdecydował się na pomiar tej samej składowej swojego spinu. Dla stanu produktowego właśnie informacje tego typu są całkowicie wykluczone.

Tak więc dla każdego stanu pewne rzeczy daje się przewidzieć, a innych nie. W stanie produktowym możemy uzyskiwać statystyczne przewidywania dotyczące pomiarów wykonywanych na każdym z podukładów z osobna, ale pomiary Alice nie powiedzą nam nic o układzie Boba. Z kolei w stanie maksymalnie splątanym Alice nie potrafi przewidzieć żadnych wyników własnych pomiarów, ale wie bardzo dużo o związkach między tymi wynikami a rezultatami otrzymywanymi przez Boba.

7.8 PROCES POMIARU

Przekonaliśmy się już, że układy kwantowe zmieniają się w czasie na dwa, na pierwszy rzut oka kompletnie niedające się pogodzić sposoby: między pomiarami przez ewolucję unitarną, a podczas pomiaru przez kolaps funkcji falowej. Ten fakt doprowadził do burzliwych dyskusji i wielu mylących stwierdzeń na temat tak zwanej rzeczywistości. Mam zamiar ich uniknąć, skupiając się zamiast tego na faktach. Kiedy już dowiecie się, jak działa mechanika kwantowa, będziecie mogli sami zdecydować, czy faktycznie występuje tu jakiś problem.

Na początku zauważmy, że w każdym pomiarze musi występować układ i instrument pomiarowy. Skoro jednak mechanika kwantowa jest spójną teorią, to powinno być możliwe połączenie układu i instrumentu w jeden większy układ. Dla uproszczenia sytuacji założymy, że początkowy układ to pojedynczy spin. Instrument A będzie taki sam jak ten wykorzystany w pierwszym wykładzie. Jego okienko może pokazać trzy możliwe odczyty. Pierwszy to pusty obrazek, odpowiadający neutralnemu stanowi instrumentu, zanim oddziała on ze spinem. Dwa pozostałe odczyty oznaczają dwa możliwe wyniki pomiaru: +1 i –1.

Jeśli instrument sam jest układem kwantowym (a przecież inaczej być nie może), to opisuje go pewna przestrzeń stanów. W naszej najprostszej sytuacji będą istniały dokładnie trzy stany: stan pusty przed pomiarem i dwa odpowiadające różnym wynikom pomiaru. Wektory bazowe dla instrumentu możemy więc oznaczyć

$$|b\}$$

$$|+1\}$$

$$|-1\}$$

Jednocześnie za stany bazowe spinu możemy przyjąć dobrze już nam znane stany „w górę” i „w dół”:

$$|g\rangle$$

$$|d\rangle$$

Korzystając z tych dwóch zbiorów wektorów bazowych, możemy zbudować złożoną przestrzeń stanów (będącą iloczynem tensorowym), mającą sześć wektorów bazowych:

$$|g, b\rangle$$

$$|g,+1\rangle$$

$$|g,-1\rangle$$

$$|d,b\rangle$$

$$|d,+1\rangle$$

$$|d,-1\rangle$$

Dokładny mechanizm tego, co dzieje się, gdy układ oddziałuje z instrumentem, może być skomplikowany, ale wolno nam przyjąć pewne założenie dotyczące ewolucji połączonego układu. Załóżmy, że na początku instrument znajduje się w stanie pustym, a spin jest skierowany w górę. Umawiamy się, że gdy instrument oddziała już ze spinem, stan końcowy jest równy

$$|g,+1\rangle$$

Inaczej mówiąc, oddziaływanie nie zmienia spinu, ale przerzuca stan instrumentu na +1. Zapisujemy to symbolicznie jako

$$|g,b\rangle \rightarrow |g,+1\rangle$$

(7.28)

Podobnie możemy założyć, że jeśli początkowo spin był skierowany w dół, to stan instrumentu zmieni się po pomiarze na –1:

$$|d,b\rangle \rightarrow |d,-1\rangle$$

(7.29)

Tak więc spoglądając na instrument po tym, kiedy oddziała on ze spinem, możemy stwierdzić, jak spin wyglądał na początku. Przypuśćmy teraz, że początkowy stan spinu był ogólniejszy, czyli wyglądał tak:

$$\alpha_g |g\rangle + \alpha_d |d\rangle$$

Jeśli uznamy instrument za część układu, to stan początkowy będzie równy

$$\alpha_g |g,b\rangle + \alpha_d |d,b\rangle$$

(7.30)

Ten stan początkowy to stan produktowy, a ściślej iloczyn tensorowy początkowego stanu spinu i „pustego" stanu instrumentu. Możesz sprawdzić, że jest całkowicie wolny od splątania.

***

<u>Ćwiczenie 7.10. Sprawdź, że wektor stanu z równania 7.30 przedstawia stan całkowicie wolny od splątania.</u>

***

Ponieważ równania 7.28 i 7.29 pozwalają nam stwierdzić, jak zmieniają się w czasie pojedyncze czynniki z 7.30, łatwo możemy wyznaczyć stan końcowy:

$$\alpha_g |g,b\rangle + \alpha_d |d,b\rangle \rightarrow \alpha_g |g,+1\rangle + \alpha_d |d,-1\rangle$$

Ten stan końcowy jest stanem splątanym. Co więcej, jeśli $a_g = -a_d$, to jest on maksymalnie splątanym stanem singletowym. Istotnie,

wystarczy spojrzeć na instrument, by natychmiast stwierdzić, jaki jest stan spinu: jeśli instrument pokazuje +1, to spin jest skierowany w górę, a jeśli –1, to spin jest skierowany w dół. Ponadto prawdopodobieństwo tego, że instrument ostatecznie pokazuje +1, wynosi

$$\alpha_g^* \alpha_g$$

Ta liczba to prawdopodobieństwo – jest ono takie samo jak początkowe prawdopodobieństwo tego, że spin był skierowany w górę. Przy takim opisie pomiaru nie występuje żaden kolaps funkcji falowej. Splątanie między instrumentem a badanym układem powstaje w wyniku unitarnej ewolucji wektora stanu.

Jedyny problem leży w tym, że w pewnym sensie tylko odsunęliśmy kłopoty na później. Trudno uznać za zadowalające stwierdzenie, że instrument dopóty „zna" stan spinu, dopóki osoba przeprowadzająca doświadczenie – powiedzmy Alice – nie będzie mogła odczytać uzyskanego wyniku. Czy nie jest prawdą, że jeśli to zrobi, to spowoduje kolaps funkcji falowej naszego układu złożonego? Tak i nie. Z punktu widzenia Alice odpowiedź brzmi tak: dziewczyna dojdzie do wniosku, że instrument, a wraz z nim i spin, znalazł się w jednej z dwóch możliwych konfiguracji, i będzie dalej postępować zgodnie z taką wiedzą.

Weźmy teraz pod uwagę Boba. Na razie nie oddziaływał on w żaden sposób ze spinem, instrumentem ani Alice. Z jego punktu widzenia cała ta trójka tworzy pojedynczy układ kwantowy. Kiedy Alice spojrzała na instrument, nie nastąpił żaden kolaps funkcji falowej. Bob stwierdziłby po prostu, że Alice stała się splątana z pozostałymi dwoma składnikami tego układu.

Wszystko to wygląda bardzo ładnie, ale co się stanie, gdy Bob spojrzy na Alice? Wówczas uzna, że doszło do kolapsu funkcji falowej. Ale przecież mamy jeszcze do dyspozycji starego druha Charliego...

Czy ostatnia osoba, która spogląda na układ, powoduje kolaps funkcji falowej czy tylko tworzy z nim stan splątany? Czy w ogóle

można mówić o „ostatnim obserwatorze”? Nie będę próbował odpowiedzieć tu na te pytania, ale chciałbym podkreślić, że nasz opis pokazuje, iż mechanika kwantowa daje nam spójną metodę obliczania prawdopodobieństw dla pewnego rodzaju doświadczeń związanych z układem i instrumentem pomiarowym. Korzystamy z niej, uzyskując poprawne odpowiedzi, ale kiedy próbujemy zadawać pytania dotyczące leżącej u jej podłoża „rzeczywistości”, wchodzimy na grząski grunt.

7.9 SPLĄTANIE I LOKALNOŚĆ

Czy mechanika kwantowa łamie zasadę lokalności? Niektórzy tak właśnie uważają. Einstein głośno protestował przeciwko „dziwnemu działaniu na odległość” (*spukhafte Fernwirkung*), które uważał za konsekwencję mechaniki kwantowej. John Bell zaś zyskał niemalże kultowy status, gdy udowodnił, że mechanika kwantowa jest nielokalna.

Z kolei większość fizyków teoretycznych, zwłaszcza tych zajmujących się kwantową teorią pola, twierdzi coś przeciwnego: prawidłowo stosowana mechanika kwantowa zapewnia, że lokalność jest respektowana.

Problem leży oczywiście w tym, że każda z obu grup rozumie przez *lokalność* coś innego. Zacznijmy od interpretacji tego pojęcia przyjmowanej przez teoretyków zajmujących się teorią pola. Z ich punktu widzenia lokalność można rozumieć tylko na jeden sposób: oznacza ona, że niemożliwe jest przesłanie sygnału z prędkością większą od prędkości światła. Pokażę ci teraz, jak mechanika kwantowa wymusza ten warunek.

Przede wszystkim chciałbym sprecyzować definicję *układu Alice* i *układu Boba*. Dotąd używałem określenia *układ Alice* na pewien układ, który ma ona przy sobie i na którym może wykonywać eksperymenty. Od tej pory do końca rozdziału będę rozumiał przez to pojęcie coś innego: układ Alice składa się nie tylko z jakiegoś układu, który wraz z nią podróżuje, lecz także z instrumentu

pomiarowego, którego używa, a nawet z niej samej. To samo dotyczy oczywiście układu Boba. Bazowe wektory ket

$$|a\}$$

opisują wszystko, z czym Alice może oddziaływać. Podobnie wektory ket

$$|b\rangle$$

opisują wszystko, z czym może oddziałać Bob. Wreszcie stany z iloczynu tensorowego,

$$|ab\rangle$$

opisują połączone światy Alice i Boba.

Załóżmy, że Alice i Bob w pewnym momencie w przeszłości znajdowali się na tyle blisko siebie, że mogli ze sobą oddziaływać, ale teraz Alice przebywa na Alfie Centauri, a Bob w Palo Alto. Łączna funkcja falowa Alice i Boba,

$$\psi(ab)$$

może być splątana. Kompletny opis układu Alice, posiadanego przez nią instrumentu pomiarowego i jej samej jest zawarty w jej macierzy gęstości ρ:

$$\rho_{aa'} = \sum_b \psi^*(a'b)\psi(ab)$$

(7.31)

Rozważmy następujące pytanie: czy Bob, przebywając tak daleko, może zrobić cokolwiek, by natychmiast zmienić macierz gęstości -

Alice? Pamiętajmy, że jego możliwości są ograniczone regułami mechaniki kwantowej. W szczególności ewolucja układu Boba, niezależnie od tego, co ją wywołuje, musi być unitarna. Inaczej mówiąc, musi ją opisywać macierz unitarna

$$\mathbf{U}_{bb'}$$

Macierz **U** przedstawia wszystko, co może się przydarzyć układowi Boba, niezależnie od tego, czy będzie on wykonywał jakieś eksperymenty czy nie. Działa ona na funkcję falową, tworząc nową funkcję falową, którą nazwiemy „końcową”:

$$\psi_{final}(ab) = \sum_{b'} \mathbf{U}_{bb'} \psi(ab')$$

Możemy też zapisać sprzężenie zespolone tej funkcji:

$$\psi^*_{final}(a'b) = \sum_{b''} \psi^*(a'b'')\mathbf{U}^\dagger_{b''b}$$

Zauważ, że aby uniknąć potencjalnie prowadzącego do pomyłek zamieszania w następnym kroku, do niektórych symboli dodaliśmy primy. Obliczmy teraz nową macierz gęstości Alice. Wykorzystamy do tego równanie 7.31, ale zastąpimy w nim początkowe funkcje falowe końcowymi:

$$\rho_{aa'} = \sum_{b,b',b''} \psi^*(a'b'')\mathbf{U}^\dagger_{b''b}\mathbf{U}_{bb'}\psi(ab')$$

Mamy teraz do czynienia z całą gromadą indeksów, ale związana z ich analizą matematyka nie jest tak trudna, na jaką wygląda. Przyjrzyjmy się temu, jak macierze **U** występują w kombinacjach

$$\mathbf{U}^\dagger_{b''b}\mathbf{U}_{bb'}$$

Ta kombinacja to po prostu iloczyn macierzowy $\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U}$. Przypomnijmy jednak, że **U** to macierz unitarna. Oznacza to, że iloczyn $\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U}$ to macierz jednostkowa $\delta_{b'b''}$. Tak jak poprzednio, wynika z tego, że powinniśmy pozostawić w sumie wszystkie te czynniki, dla których $b' = b''$, a zignorować wszystkie pozostałe. Po tym uproszczeniu dostajemy

$$\rho_{aa'} = \sum_{b} \psi^{*}(a'b)\psi(ab)$$

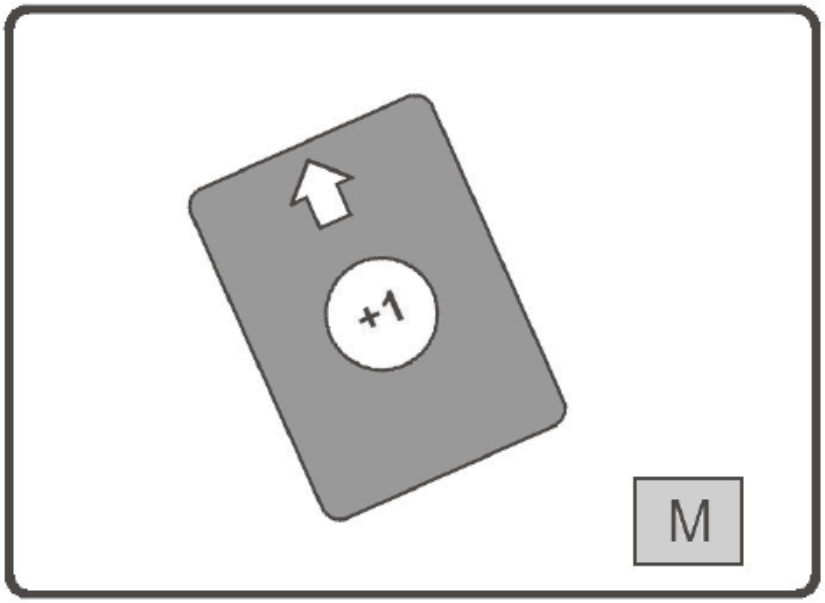
Ostatnie wyrażenie jest równe temu, które występowało w równaniu 7.31. Inaczej mówiąc, *macierz $\rho_{aa'}$ wygląda tak samo jak przed działaniem* **U**. Nic, co dzieje się u Boba, nie może mieć natychmiastowego wpływu na macierz gęstości Alice, nawet jeśli łączny stan Alice i Boba jest maksymalnie splątany. Oznacza to, że punkt widzenia Alice na jej podukład (jej model statystyczny) pozostaje zupełnie bez zmian. Ten godny uwagi wniosek może się wydawać zaskakujący w odniesieniu do układu maksymalnie splątanego, ale jednocześnie gwarantuje, że niemożliwe jest przesłanie sygnału z prędkością większą od prędkości światła.

7.10 KWANTOWY SYMULATOR: WPROWADZENIE DO TWIERDZENIA BELLA

Co ciekawe, unitarność w bardzo istotnym stopniu przyczyniła się do tego, że żaden sygnał nie może zostać przesłany momentalnie. Jeśli macierz **U** nie byłaby unitarna, ostateczna macierz gęstości Alice faktycznie mogłaby się zmienić pod wpływem tego, co działo się u Boba.

Co wobec tego tak bardzo niepokoiło Einsteina, gdy mówił o dziwnym działaniu na odległość? Aby odpowiedzieć na to pytanie, trzeba zrozumieć, że on i Bell mówili o zupełnie innym pojęciu lokalności. Chcąc zilustrować ten fakt, wymyślę pewną grę

komputerową. Jej zadaniem będzie nabranie cię, tak byś uznał, że w polu magnetycznym wewnątrz komputera znajduje się spin kwantowy. Będziesz mógł wykonywać eksperymenty, mające przetestować taką ewentualność. Przyjrzyj się ilustracji 7.1, przedstawiającej odpowiedni schemat.



Ilustracja 7.1. Kwantowy symulator. Ekran komputera pokazuje orientację instrumentu, którą użytkownik może dowolnie zmieniać. Dla uproszczenia sytuacji na schemacie widać tylko orientację w dwóch wymiarach. Za każdym razem, kiedy użytkownik chce wykonać pomiar spinu, naciska klawisz „P" (niepokazany na ilustracji). Między kolejnymi pomiarami stan spinu zmienia się zgodnie z równaniem Schrödingera.

Wszystko działa następująco: w pamięci komputera przechowywane są dwie liczby zespolone, a_g i a_d, podlegające zwykłej regule normalizacji:

$$\alpha_g^* \alpha_g + \alpha_d^* \alpha_d = 1$$

Na początku gry współczynnikom *a* zostają nadane pewne wartości. Następnie komputer rozwiązuje równanie Schrödingera,

modyfikując w miarę upływu czasu wartości *a*, tak jakby były składowymi pewnego wektora stanu opisującego spin.

Komputer przechowuje w pamięci również klasyczną trójwymiarową orientację instrumentu, wyrażoną jako dwa kąty albo pewien wektor jednostkowy. Przy użyciu klawiatury możesz najpierw ustalić te kąty, a następnie dowolnie je przestawiać. W pamięci znajduje się jeszcze jedna dana, a mianowicie liczba (+1 lub –1) odpowiadająca wartości wyświetlanej w okienku instrumentu pomiarowego. Ekran komputera pokazuje instrument. Jako eksperymentator możesz wybrać jego orientację. Dysponujesz też klawiszem „P", który uruchamia instrument.

Ostatnim składnikiem programu jest generator liczb losowych, podający wyniki pomiarów jako +1 lub –1 z prawdopodobieństwami równymi odpowiednio $\alpha_g^* \alpha_g$ i $\alpha_d^* \alpha_d$. Pamiętaj, że generatory liczb losowych tak naprawdę nie generują liczb losowych; wyłącznie je symulują. Są oparte na czysto klasycznych, deterministycznych mechanizmach, wykorzystujących ciągi takie jak na przykład kolejne cyfry rozwinięcia dziesiętnego π, by generować pewne liczby. Tak czy inaczej, są wystarczająco efektywne, byś dał się nabrać.

Gra rozpoczyna się, a komputer ciągle uaktualnia wartości a_g i a_d. Czekasz tak długo, jak tylko chcesz, a następnie naciskasz „P". Wówczas komputer przy użyciu generatora liczb losowych podaje wynik pomiaru, wyświetlając go na ekranie. Na podstawie tego wyniku komputer uaktualnia stan metodą kolapsu: jeśli uzyskano +1, to wartość a_d zostaje ustalona jako 0, a wartość a_g na 1. Jeśli zaś uzyskano –1, to wartość a_d zostaje ustalona jako 1, a wartość a_g na 0. Następnie kontrolę nad ewolucją przejmuje równanie Schrödingera, aż do momentu, gdy znów naciśniesz „P".

Jako dobry eksperymentator przeprowadzasz wiele prób i zbierasz uzyskane dane, które następnie porównujesz z przewidywaniami kwantowomechanicznymi. Jeśli wszystko działa tak jak powinno, to dojdziesz do wniosku, że mechanika kwantowa podaje poprawny opis zjawisk zachodzących w komputerze, niezależnie od tego, jak naprawdę wyglądają. Oczywiście komputer pozostaje całkowicie klasyczny, ale symuluje spin kwantowy bez większych trudności.

Spróbujmy teraz tej samej gry z dwoma komputerami, A i B, symulującymi dwa stany kwantowe. Jeśli spiny znajdują się początkowo w stanie produktowym i później już nigdy nie oddziałują ze sobą, to możemy po prostu grać na każdym komputerze z osobna, nigdy się ze sobą nie komunikując. Teraz jednak przychodzą nam znów na pomoc Alice, Bob i Charlie. Charlie, rzecz jasna, chce utworzyć parę splątaną. Zaczyna od połączenia dwóch komputerów kablem, tak by utworzyły pojedynczy komputer. Zakładamy, że przez kabel można przesyłać sygnały odbierane natychmiast po drugiej stronie. Połączony komputer przechowuje teraz w pamięci cztery liczby,

$$\alpha_{gg}, \alpha_{gd}, \alpha_{dg}, \alpha_{dd},$$

a w miarę upływu czasu uaktualnia ich wartości na podstawie równania Schrödingera. Każdy z dwóch ekranów pokazuje instrument pomiarowy: ekran Alice pokazuje **A**, a ekran Boba **B**. Każdy z instrumentów można ustawić w kierunku niezależnym od drugiego, i każdy ma własny przycisk „P”. Kiedy któryś z tych przycisków zostaje naciśnięty, wspólna pamięć komputera (przy użyciu generatora liczb losowych) wysyła sygnał do odpowiedniego instrumentu i na jego ekranie pojawia się uzyskany wynik.

Czy takie urządzenie może symulować mechanikę kwantową układu złożonego z dwóch spinów? Tak, o ile nie rozłączymy kabla między dwoma komputerami i o ile nadal będzie można przesyłać nim sygnały z nieskończoną prędkością. Jeśli układ nie znajduje się stale w stanie produktowym, rozłączenie komputerów doprowadzi do załamania się symulacji.

Czy możemy to udowodnić? Kolejny raz odpowiedź na podobne pytanie okazuje się pozytywna – i zasadniczo na tym właśnie polega twierdzenie Bella. Dowolna klasyczna symulacja mechaniki kwantowej, która próbuje rozdzielić przestrzennie instrumenty Alice i Boba, musi zawierać zdolny do przesyłania nieskończenie szybkich sygnałów kabel łączący oddzielne komputery oraz pamięć centralną, w której można przechowywać i uaktualniać wektor stanu.

Czy nie oznacza to jednak, że przez kabel można przesyłać wiadomości łamiące regułę lokalności? Tak właśnie by było, gdyby Alice, Bob i Charlie mogli robić wszystko to, co jest możliwe w klasycznych układach nierelatywistycznych[36]. Jeśli jednak jedyne dostępne im operacje to te, które symulują operacje kwantowe, odpowiedź brzmi: nie. Jak przekonaliśmy się wcześniej, mechanika kwantowa nie pozwala działaniom Boba wpłynąć w żaden sposób na macierz gęstości Alice.

Problem, na który się natknęliśmy, nie dotyczy bezpośrednio mechaniki kwantowej, tylko jej *symulacji* przy użyciu komputera klasycznego. To właśnie mówi twierdzenie Bella: aby komputery klasyczne mogły symulować splątanie, należałoby je połączyć kablem pozwalającym na przesyłanie sygnałów z nieskończoną prędkością.

7.11 PODSUMOWANIE WIADOMOŚCI O SPLĄTANIU

Wśród wszystkich sprzecznych z intuicją koncepcji, do których przyjęcia zmusza nas mechanika kwantowa, splątanie może być najtrudniejsze do zaakceptowania. Klasyczny odpowiednik układu, którego pełny opis nie zawiera żadnych informacji o jego pojedynczych składowych, po prostu nie istnieje. Okazuje się, że nielokalność trudno nawet zdefiniować. Najlepszy sposób na pogodzenie się z tą sytuacją to przyswojenie sobie odpowiednich faktów matematycznych. Przedstawimy teraz krótkie podsumowanie tego, czego dowiedzieliśmy się o splątaniu. Skupiliśmy się na naszkicowaniu różnic między stanami maksymalnie splątanymi, częściowo splątanymi i wolnymi od splątania, przygotowując „fiszki” odpowiadające trzem konkretnym przykładom – stanowi singletowemu, stanowi produktowemu i stanowi „niemal singletowemu”. Mamy nadzieję, że ten sposób prezentacji materiału pomoże ci dobrze zrozumieć matematyczne podobieństwa i różnice. Zanim przejdziesz dalej, poświęć trochę czasu na powtórzenie tych wiadomości i wykonanie znajdujących się niżej ćwiczeń.

27 W wykładzie 3 zapisywaliśmy indeks *k* po lewej stronie **M**, a indeks *j* po prawej, tu zaś robimy to odwrotnie. Ponieważ *j* i *k* to zmienne oznaczające indeksy, nie ma to żadnego znaczenia, pod warunkiem że przekształcając kolejne równania, będziemy się trzymać jednego wyboru.

28 Rzecz jasna, moglibyśmy też użyć innego zestawu wektorów bazowych, na przykład $|pp\rangle$ i $|pl\rangle$. Otrzymalibyśmy wówczas inny układ elementów macierzowych.

29 Terminologia używana przez autorów jest tym razem niestandardowa – zwykle w matematyce określenie „iloczyn zewnętrzny" oznacza coś innego (przyp. tłum.).

30 Czasami możemy też zmienić kolejność od lewej do prawej, ale wymaga to dużo więcej ostrożności.

31 Macierz hermitowską **M** można zdiagonalizować za pomocą transformacji $\mathbf{P}^{\dagger}\mathbf{M}\mathbf{P}$, gdzie **P** jest macierzą unitarną, której wiersze to znormalizowane wektory własne **M**. Ślad **M** nie zmienia się przy tej transformacji. Nie udowodniliśmy tego faktu, ale jest on dobrze znany.

32 Kiedy piszemy „rozmyta", mamy na myśli to, że $\rho(x_1, x_2, p_1, p_2)$ będzie przyjmować niezerowe wartości w różnych punktach swojej dziedziny, a nie tylko w jednym punkcie. Im większa jest liczba odpowiednich punktów, tym bardziej „rozmyta" staje się ρ.

33 Moglibyśmy ją też nazwać iloczynem Kroneckera, gdyż mamy do czynienia z macierzami. Na nasze potrzeby formalne rozróżnienie nie odgrywa tu żadnej roli.

34 Jak wspomnieliśmy wcześniej, w podrozdziale 7.2, macierz hermitowską **M** można zdiagonalizować za pomocą przekształcenia $\mathbf{P}^{\dagger}\mathbf{M}\mathbf{P}$, gdzie **P** to macierz unitarna o kolumnach będących znormalizowanymi wektorami własnymi **M**.

35 Art jest poetą, choć sam nie zdaje sobie z tego sprawy.

36 Inaczej mówiąc, w układach, w których możliwe jest przesyłanie sygnałów z nieskończoną prędkością.

Fiszka z wiadomościami o wektorze stanu nr 1

Nazwa: stan produktowy (brak splątania)
Przydatny z uwagi na: wyjątkowo silną lokalność, zdolność do udawania układu klasycznego.
Opis: każdy podukład jest w pełni scharakteryzowany. Między układami Alice i Boba nie ma żadnych korelacji.

Wektor stanu:

$$\alpha_g\beta_g|gg\rangle+\alpha_g\beta_d|gd\rangle+\alpha_d\beta_g|dg\rangle+\alpha_d\beta_d|dd\rangle$$

Normalizacja:

$$\alpha_g^*\alpha_g+\alpha_d^*\alpha_d=1$$

$$\beta_g^*\beta_g+\beta_d^*\beta_d=1$$

Macierz gęstości: macierz gęstości Alice ma dokładnie jedną niezerową wartość własną, równą 1. Wektor własny odpowiadający tej wartości własnej to funkcja falowa podukładu Alice. Podobnie jest dla podukładu Boba.
Funkcja falowa: rozkłada się na czynniki: $\psi(a)\varphi(b)$
Wartości oczekiwane:

$$\langle\sigma_x\rangle^2+\langle\sigma_y\rangle^2+\langle\sigma_z\rangle^2=1$$

$$\langle\tau_x\rangle^2+\langle\tau_y\rangle^2+\langle\tau_z\rangle^2=1$$

Korelacje:

$$\langle \sigma_z \tau_z \rangle - \langle \sigma_z \rangle \langle \tau_z \rangle = 0$$

Fiszka z wiadomościami o wektorze stanu nr 2

Nazwa: stan singletowy (maksymalnie splątany)
Przydatny z uwagi na: nielokalność, pełną dziwaczność kwantową
Opis: układ złożony jest w pełni scharakteryzowany jako całość. O podukładach Alice i Boba nic się nie da powiedzieć.

Wektor stanu:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|gd\rangle - |dg\rangle\right)$$

Normalizacja:

$$\psi_{gg}^{*}\psi_{gg} + \psi_{gd}^{*}\psi_{gd} + \psi_{dg}^{*}\psi_{dg} + \psi_{dd}^{*}\psi_{dd} = 1$$

Macierz gęstości: pełny układ złożony: $\rho^2 = \rho$ i $Tr\left(\rho^2\right) = 1$.
Podukład Alice: macierz gęstości jest proporcjonalna do macierzy jednostkowej, ma równe wartości własne sumujące się do 1. Każdy wynik pomiaru jest więc jednakowo prawdopodobny, $\rho^2 \neq \rho$ i $Tr\left(\rho^2\right) < 1$.
Funkcja falowa: nie rozkłada się na czynniki: $\psi(a, b)$
Wartości oczekiwane:

$$\langle\sigma_z\rangle, \langle\sigma_x\rangle, \langle\sigma_y\rangle = 0$$

$$\langle\tau_z\rangle, \langle\tau_x\rangle, \langle\tau_y\rangle = 0$$

$$\langle \tau_z \sigma_z \rangle, \langle \tau_x \sigma_x \rangle, \langle \tau_y \sigma_y \rangle = -1$$

Korelacje:

$$\langle \sigma_z \tau_z \rangle - \langle \sigma_z \rangle \langle \tau_z \rangle = -1$$

Fiszka z wiadomościami o wektorze stanu nr 3

Nazwa: stan „niemal singletowy” (częściowo splątany)
Przydatny z uwagi na: niezdecydowanie, ogólną rozmytość, kłopoty z odróżnieniem *góry* od *dołu*.
Opis: posiadamy pewną wiedzę o układzie złożonym i pewną o każdym z podukładów. W każdym z wypadków jest ona niekompletna.

Wektor stanu:

$$\sqrt{0,6}\left|gd\right\rangle-\sqrt{0,4}\left|dg\right\rangle$$

Normalizacja:

$$\psi_{gg}^{*}\psi_{gg}+\psi_{gd}^{*}\psi_{gd}+\psi_{dg}^{*}\psi_{dg}+\psi_{dd}^{*}\psi_{dd}=1$$

Macierz gęstości: pełny układ złożony: $\rho^2=\rho$ i $Tr\left(\rho^2\right)=1$.
Podukład Alice: $\rho^2\neq\rho$ i $Tr\left(\rho^2\right)<1$.
Funkcja falowa: nie rozkłada się na czynniki: $\psi(a, b)$
Wartości oczekiwane:

$$\left\langle\sigma_z\right\rangle=0,2$$

$$\left\langle\sigma_x\right\rangle,\left\langle\sigma_y\right\rangle=0;\ \left\langle\tau_z\right\rangle=-0,2$$

$$\left\langle\tau_x\right\rangle,\left\langle\tau_y\right\rangle=0$$

$$\left\langle\tau_z\sigma_z\right\rangle=-1$$

$$\langle \tau_x \sigma_x \rangle = -\sqrt{0,24}$$

Korelacje: $\langle \sigma_z \tau_z \rangle - \langle \sigma_z \rangle \langle \tau_z \rangle = -0,96$ w tym konkretnym wypadku. Dla ogólnych stanów częściowo splątanych korelacje przyjmują wartości między –1 a +1, ale nie są dokładnie równe zeru.

***

Ćwiczenie 7.11. Oblicz macierz gęstości Alice dla σz i dla stanu „niemal singletowego”.

***

Ćwiczenie 7.12. Sprawdź konkretne wartości liczbowe podane na każdej z fiszek.

***

WYKŁAD 8

Cząstki i fale

Art i Lenny mają jak na razie dosyć splątania. Woleliby teraz zająć się czymś prostszym.

– Hej, Hilbert, masz coś jednowymiarowego? – pyta Lenny.
– Daj mi chwilkę, zaraz sprawdzę. Ostatnio pojedyncze wymiary są bardzo popularne. Czasami kończą się przed zamknięciem baru.
– Jeśli nie ma nic innego, mogę wziąć coś klasycznego.
– Nie tutaj, przyjacielu. Zabraliby nam licencję.
– Celna uwaga.

Z punktu widzenia spotkanego na ulicy przechodnia mechanika kwantowa kojarzy się przede wszystkim z tym, że światło to cząstki, a elektrony to fale. Do tej pory jednak prawie w ogóle nie wspominałem o cząstkach, a jedyną okazją, kiedy pojawiło się słowo fala, było rozważanie funkcji falowej, która na razie nie miała nic wspólnego z falami. Kiedy wobec tego wreszcie zaczniemy mówić o „prawdziwej" mechanice kwantowej?

Odpowiedź rzecz jasna polega na tym, że sedno prawdziwej mechaniki kwantowej leży nie w cząstkach czy falach, lecz w odmiennych od klasycznych zasadach logicznych rządzących ich zachowaniem. Jak się przekonasz w tym wykładzie, dualizm cząstkowo-falowy jest prostą konsekwencją faktów, które już poznałeś. Zanim jednak zabierzemy się do fizyki, chciałbym

przedstawić trochę matematyki. Część tego materiału jest ci już na pewno znajoma – pojawiła się we wcześniejszych wykładach – a część może być dla ciebie nowa.

8.1 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – WŁASNOŚCI FUNKCJI CIĄGŁYCH

8.1.1 Powtórzenie wiadomości o funkcjach falowych

W tym wykładzie będziemy posługiwali się językiem funkcji falowych, zanim więc zabierzemy się na poważnie do pracy, przypomnijmy, co już o nich wiemy. W wykładzie 5 wprowadziliśmy funkcje falowe jako pojęcia abstrakcyjne, nie wyjaśniając, co mają one wspólnego z funkcjami czy falami. Zanim wypełnimy ten brak, powtórzę to, czego się już o nich dowiedzieliśmy.

Zacznijmy od wyboru obserwabli **L** o wartościach własnych λ i wektorach własnych $|\lambda$. Niech $|\Psi$ będzie wektorem stanu. Ponieważ wektory własne operatora hermitowskiego tworzą bazę ortonormalną, wektor $|\Psi$ można przedstawić w postaci

$$|\Psi\rangle = \sum_{\lambda} \psi(\lambda)|\lambda\rangle$$

(8.1)

Jak pewnie pamiętasz z rozdziałów 5.1.2 i 5.1.3, wielkości

$$\psi(\lambda)$$

nazywa się funkcją falową układu. Zwróć jednak uwagę na to, że konkretna postać $\psi(\lambda)$ zależy od tego, jaką konkretną obserwablę **L**

wybraliśmy na początku. Jeśli wybierzemy inną, to funkcja falowa (wraz z wektorami bazowymi i wartościami własnymi) zmieni się, choć *nadal będziemy mówili o tym samym stanie*. Powinniśmy więc raczej powiedzieć, że $\psi(\lambda)$ to funkcja falowa związana z $|\Psi$, a nawet, bardziej precyzyjnie, że $\psi(\lambda)$ to funkcja falowa w bazie **L**. Jeśli wykorzystamy własności ortonormalności wektorów bazowych,

$$\langle \lambda_i | \lambda_j \rangle = \sigma_{ij}$$

to funkcję falową w bazie **L** możemy utożsamić z iloczynami skalarnymi wektora stanu $|\Psi$ z wektorami własnymi $|\lambda$ (czy z projekcjami $|\Psi$ na $|\lambda$):

$$\psi(\lambda) = \langle \lambda | \Psi \rangle$$

O funkcji falowej możesz myśleć na dwa sposoby. Po pierwsze, możesz ją traktować jako zestaw składowych wektora stanu w pewnej konkretnej bazie. Składowe te można ustawić w wektor kolumnowy:

$$\begin{pmatrix} \psi(\lambda_1) \\ \psi(\lambda_2) \\ \psi(\lambda_3) \\ \psi(\lambda_4) \\ \psi(\lambda_5) \end{pmatrix}$$

Po drugie, możesz myśleć o funkcji falowej jako o funkcji zmiennej λ. Jeśli podasz jakąś dopuszczalną wartość λ, to $\psi(\lambda)$ daje pewną liczbę zespoloną. Można więc stwierdzić, że

$\psi(\lambda)$

to *funkcja dyskretnej zmiennej λ, przyjmująca wartości zespolone.* Kiedy przyjmiemy ten punkt widzenia, operatory liniowe stają się operacjami działającymi na funkcjach i zwracającymi inne funkcje.

Pozostało nam przypomnieć o jeszcze jednym fakcie: prawdopodobieństwo tego, że w danym eksperymencie otrzymamy wynik *λ*, wynosi

$$P(\lambda) = \psi^*(\lambda)\psi(\lambda)$$

8.1.2 FUNKCJE JAKO WEKTORY

Do tej pory układy, którymi się zajmowaliśmy, miały skończenie wymiarowe przestrzenie stanów. Na przykład pojedynczy spin jest opisywany przez dwuwymiarową przestrzeń stanów. Z uwagi na ten fakt obserwable przyjmowały tylko skończoną liczbę wartości. Istnieją jednak bardziej skomplikowane obserwable, które mogą przyjmować nieskończenie wiele wartości. Rozważmy przykład pojedynczej cząstki. Jej współrzędne to obserwable, które, w odróżnieniu od spinu, mogą przyjmować nieskończenie wiele różnych wartości. Cząstkę poruszającą się wzdłuż osi *x* można znaleźć w dowolnym rzeczywistym *x*. Inaczej mówiąc, *x* to ciągła zmienna o nieskończonym charakterze. Kiedy obserwable układu są ciągłe, funkcja falowa naprawdę staje się funkcją zależną od ciągłej zmiennej. Aby móc zastosować do badania takiego układu mechanikę kwantową, musimy rozszerzyć ideę wektorów, tak by dopuszczała również funkcje.

Funkcje to funkcje, a wektory to wektory – wydają się kompletnie różnymi obiektami, a więc w jakim sensie funkcje mają być wektorami? Jeśli myśli się o wektorach jako o strzałkach wskazujących kierunki w trójwymiarowej przestrzeni, to nie są one tym samym co funkcje. Jeśli jednak spojrzy się na wektory szerzej, traktując je jako zbiór obiektów matematycznych spełniających pewne postulaty, to funkcje faktycznie mogą tworzyć przestrzeń wektorową. Szczególny przypadek takiej przestrzeni nazywa się

często przestrzenią Hilberta, od nazwiska niemieckiego matematyka Davida Hilberta.

Rozważmy zbiór funkcji zespolonych $\psi(x)$ zmiennej rzeczywistej x. Kiedy mówię o funkcjach zespolonych, mam na myśli to, że dla każdego x liczba $\psi(x)$ to liczba zespolona. Z kolei niezależna zmienna x to zwykła zmienna rzeczywista. Może ona przyjmować dowolną wartość, od $-\infty$ do $+\infty$.

Sprecyzujmy teraz to, co mamy na myśli, mówiąc: „Funkcje to wektory". Nie chodzi tu o luźne skojarzenie czy przenośnię. Przy odpowiednich ograniczeniach (do których wrócimy) funkcje takie jak $\psi(x)$ *spełniają matematyczne aksjomaty definiujące przestrzeń wektorową*. Wspomnieliśmy o tym przelotnie w rozdziale 1.9.2, a teraz omówimy to dokładniej, następnie zaś wykorzystamy. Jeśli spojrzymy na aksjomaty definiujące zespoloną przestrzeń wektorową (przedstawione w rozdziale 1.9.1), przekonamy się, że funkcje zespolone spełniają wszystkie z nich:

1. Suma dowolnych dwóch funkcji jest funkcją.
2. Dodawanie funkcji jest przemienne.
3. Dodawanie funkcji jest łączne.
4. Istnieje dokładnie jedna *funkcja zerowa* taka, że jeśli dodamy ją do dowolnej funkcji, to dostaniemy z powrotem tę samą funkcję.
5. Dla każdej funkcji $\psi(x)$ istnieje dokładnie jedna funkcja $-\psi(x)$ taka, że $\psi(x) + (-\psi(x)) = 0$.
6. Pomnożenie funkcji przez dowolną liczbę zespoloną daje funkcję; ta operacja jest liniowa.
7. Zachodzi prawo rozdzielności, to znaczy

$$z[\psi(x)+\phi(x)] = z\psi(x) + z\phi(x)$$

$$[z+w]\psi(x) = z\psi(x) + w\psi(x)$$

gdzie z i w to liczby zespolone.

Wszystko to implikuje, że możemy utożsamić funkcje $\psi(x)$ z wektorami ket $|\Psi$ należącymi do pewnej abstrakcyjnej przestrzeni wektorowej. Pewnie nie zaskoczy cię to, że możemy tu też zdefiniować wektory ket. Wektor bra $\Psi|$ odpowiadający ketowi $|\Psi$ utożsamia się z funkcją będącą sprzężeniem zespolonym, $\psi^*(x)$.

Aby móc skutecznie korzystać z tej koncepcji, będziemy musieli uogólnić niektóre z narzędzi w naszym matematycznym arsenale. We wcześniejszych wykładach symbole indeksujące funkcje falowe należały do pewnego skończonego zbioru dyskretnego – na przykład do zbioru wartości własnych pewnej obserwabli. Teraz jednak zmienna niezależna ma charakter *ciągły*. Oznacza to między innymi, że nie możemy sumować po odpowiednich symbolach, używając zwykłego dodawania. Myślę, że wiesz, co zrobić w tej sytuacji. Oto zastępniki trzech z naszych pojęć dotyczących wektorów, przeznaczone do pracy z funkcjami. Dwa z nich są ci pewnie dobrze znane.

- Całki zastępują sumy.
- Gęstości probabilistyczne zastępują prawdopodobieństwa.
- Funkcja delta Diraca zastępuje deltę Kroneckera.

Przyjrzyjmy się tym koncepcjom bliżej.

Całki zastępują sumy: Jeśli chcielibyśmy postępować w sposób idealnie ścisły, zaczęlibyśmy od zastąpienia osi x dyskretnym zbiorem punktów rozdzielonych bardzo małymi odległościami ε, a następnie przeszlibyśmy do granicy z $\varepsilon \to 0$. Uzasadnienie każdego z tych kroków zabrałoby kilka stron. Możemy jednak uniknąć podobnych kłopotów, wprowadzając pewne zgodne z intuicją definicje, takie jak na przykład zastąpienie sum całkami. Schematycznie można to zapisać następująco:

$$\sum_i \to \int dx$$

Jeśli na przykład chcemy obliczyć pole powierzchni ograniczonej jakąś krzywą, dzielimy oś *x* na drobne kawałeczki, a następnie dodajemy do siebie pola licznych prostokątów, tak jak robi się to w elementarnej analizie. Kiedy rozmiary pojedynczych kawałków zmniejszą się do zera, suma staje się całką.

Rozważmy teraz bra $\langle\Psi|$ oraz ket $|\Phi\rangle$ i zdefiniujmy ich iloczyn skalarny. Możemy to zrobić w oczywisty sposób, zastępując sumowanie w równaniu 1.2 całką. Definiujemy więc iloczyn skalarny jako

$$\langle\Psi|\Phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\varphi(x)dx$$

(8.2)

Gęstości probabilistyczne zastępują prawdopodobieństwa: Później utożsamimy wyrażenie

$$P(x) = \psi^*(x)\psi(x)$$

z gęstością prawdopodobieństwa dla zmiennej *x*. Dlaczego właśnie z gęstością probabilistyczną, a nie po prostu z prawdopodobieństwem? Jeśli *x* jest zmienną ciągłą, to prawdopodobieństwo tego, że przyjmie ona konkretną wartość, zwykle wynosi zero. Znacznie sensowniejsze jest wtedy pytanie: jakie jest prawdopodobieństwo tego, że *x* leży między dwiema wartościami, *x = a* i *x = b*? Gęstości probabilistyczne definiuje się tak, by prawdopodobieństwo to było równe całce

$$P(a,b) = \int_a^b P(x)dx = \int_a^b \psi^*(x)\psi(x)dx$$

Ponieważ całkowite prawdopodobieństwo powinno wynosić 1, możemy zdefiniować wektor znormalizowany przez warunek

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1$$

(8.3)

Funkcja delta Diraca zastępuje deltę Kroneckera: Na razie wszystko powinno ci być dobrze znane. Funkcja delta Diraca może okazać się pewną nowością. Jest ona odpowiednikiem delty Kroneckera, δ_{ij}. Deltę Kroneckera definiuje się jako równą zeru, gdy $i \neq j$, i równą 1 dla $i = j$. Można ją jednak też określić inaczej. Rozważmy dowolny wektor F_i w przestrzeni skończenie wymiarowej. Łatwo się przekonać, że delta Kroneckera spełnia warunek

$$\sum_j \sigma_{ij} F_j = F_i$$

Wynika to z tego, że jedyny niezerowy czynnik w sumie to ten, dla którego $j = i$. Wobec tego symbol Kroneckera kasuje w sumie wszystkie składniki F oprócz F_i. Oczywiste uogólnienie polega na zdefiniowaniu nowej funkcji, która będzie miała podobne własności filtrujące, gdy pojawi się pod znakiem całki. Inaczej mówiąc, chcemy wprowadzić nowy obiekt postaci

$$\delta(x - x')$$

taki, że dla dowolnej funkcji $F(x)$ będziemy mieli

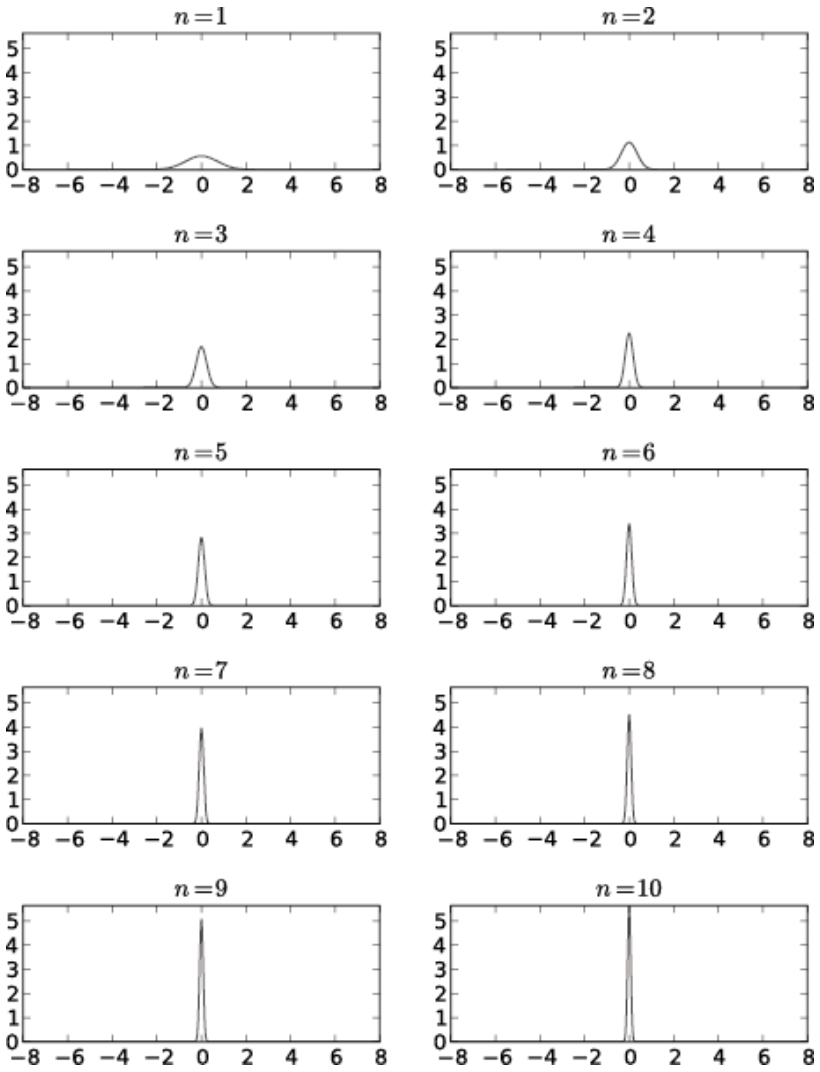
$$\int_{-\infty}^{\infty} \sigma(x - x')F(x')dx' = F(x)$$

(8.4)

Równanie 8.4 definiuje poszukiwany nowy obiekt, nazywany *funkcją delta Diraca*. Okazuje się ona podstawowym narzędziem w mechanice kwantowej. Pomimo swojej nazwy nie jest funkcją w zwykłym znaczeniu tego słowa. Kiedy $x \neq x'$, przyjmuje wartość zero, ale kiedy $x = x'$, jest nieskończona. Tak naprawdę jest nieskończona dokładnie na tyle, by pole pod $\delta(x)$ było równe 1. Z grubsza rzecz biorąc, delta Diraca to funkcja, która jest niezerowa tylko w infinitezymalnym przedziale ε, ale przyjmuje w tym przedziale wartość $1/\varepsilon$. Tak więc pole pod wykresem jest równe 1, a co ważniejsze, nowa „funkcja” spełnia równanie 8.4. Prawdziwa funkcja

$$\frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-(nx)^2}$$

stanowi rozsądne przybliżenie funkcji delta, kiedy tylko n staje się bardzo duże. Ilustracja 8.1 przedstawia wykresy tych przybliżeń dla rosnących wartości n. Chociaż przerywamy rysowanie przybliżeń dla $n = 10$, czyli dla bardzo małej wartości, zauważysz z pewnością, że wykres już wtedy staje się bardzo wąski i ma ostry wierzchołek.



Ilustracja 8.1. Przybliżenia funkcji delta Diraca. Podane przybliżenia są dane przez funkcje $\frac{n}{\sqrt{\pi}}\ e^{-(nx)^2}$ *. Kolejne wykresy odpowiadają rosnącym wartościom n.*

8.1.3 CAŁKOWANIE PRZEZ CZĘŚCI

Zanim przejdziemy do omawiania operatorów liniowych, poświęcimy trochę czasu na przypomnienie pewnej metody obliczania całek, nazywanej *całkowaniem przez części*. Jest ona dość prosta, a później się nam bardzo przyda, będziemy z niej korzystać wielokrotnie.

Przypuśćmy, że mamy do czynienia z dwiema funkcjami, *F* i *G*. Rozważmy pochodną ich iloczynu, *FG*. Możemy napisać

$$d(FG) = FdG + GdF$$

albo

$$d(FG) - GdF = FdG.$$

Obliczenie odpowiedniej całki oznaczonej daje więc

$$\int_a^b d(FG) - \int_a^b GdF = \int_a^b FdG$$

czyli

$$FG\Big|_a^b - \int_a^b GdF = \int_a^b FdG$$

To standardowy wzór, który pewnie pamiętasz z podstaw analizy. W mechanice kwantowej granice całkowania zwykle rozciągają się na całą oś rzeczywistą, a nasze funkcje falowe muszą dążyć w nieskończoności do zera, aby mogły być odpowiednio znormalizowane. Tak więc pierwszy czynnik w powyższym wyrażeniu zawsze da zero. Biorąc to pod uwagę, możemy stosować uproszczoną wersję całkowania przez części:

$$\int_{-\infty}^{\infty} F\frac{dG}{dx}dx = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dF}{dx}Gdx$$

Ta postać będzie poprawna, o ile tylko *F* i *G* będą odpowiednio dążyły do zera w nieskończoności, tak by wyraz odpowiadający za warunki brzegowe był równy zeru. Ułatwisz sobie życie, jeśli

zapamiętasz ogólną zasadę: można przenieść pochodną z jednego czynnika iloczynu pod całką do drugiego, jeśli jednocześnie zmieni się znak na przeciwny.

8.1.4 OPERATORY LINIOWE

Wektory bra i ket to tylko połowa obiektów występujących w mechanice kwantowej. Druga połowa wiąże się z pojęciem operatorów liniowych, a w szczególności operatorów hermitowskich. Prowadzi to do dwóch pytań:

- Co rozumie się przez operator liniowy działający na przestrzeni funkcji?
- Jaki warunek musi spełniać taki operator liniowy, by być hermitowski?

Pojęcie operatora liniowego jest dość proste: to urządzenie działające na funkcję i dające w wyniku kolejną funkcję. Kiedy działa ono na sumę dwóch funkcji, daje sumę dwóch odpowiednich pojedynczych wyników. Kiedy działa na funkcję pomnożoną przez liczbę zespoloną, daje początkowy wynik pomnożony przez tę samą liczbę. Inaczej mówiąc, jego działanie jest (niespodzianka!) liniowe.

Przyjrzyjmy się kilku przykładom. Prostą operacją, jaką możemy wykonać na funkcji $\psi(x)$, jest pomnożenie jej przez x. Daje to nam nową funkcję, $x\psi(x)$, i nietrudno sprawdzić, że działanie to jest liniowe. „Mnożenie przez x" przedstawimy jako operator oznaczany symbolem **X**. Jego definicja wygląda więc następująco:

$$\mathbf{X}\ \psi(x) = x\ \psi(x).$$

(8.5)

A oto kolejny przykład. Zdefiniujmy **D** jako operator różniczkowania:

$$D\psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}$$

(8.6)

***

<u>Ćwiczenie 8.1. Udowodnij, że X i D to operatory liniowe.</u>

***

To oczywiście tylko bardzo drobny podzbiór wszystkich operatorów liniowych, które moglibyśmy skonstruować, ale wkrótce się przekonamy, że **X** i **D** odgrywają centralną rolę w mechanice kwantowej cząstek.

Rozważmy teraz definiujące własności operatora hermitowskiego. Wygodny sposób określenia operatora hermitowskiego wiąże się z jego elementami macierzowymi, czyli z umieszczaniem operatora pomiędzy wektorami bra i ket. Operator **L** można między nie włożyć na dwa różne sposoby:

$$\langle \Psi | \mathbf{L} | \Phi \rangle$$

albo

$$\langle \Phi | \mathbf{L} | \Psi \rangle$$

W ogólnym przypadku nie istnieje prosta relacja łącząca ze sobą te dwa wyrażenia. Jeśli jednak operator jest hermitowski (co oznacza, że $\mathbf{L}^{\dagger} = \mathbf{L}$), są one związane ze sobą w bardzo prosty sposób: każde z nich jest zespolonym sprzężeniem drugiego:

$$\langle \Psi | \mathbf{L} | \Phi \rangle = \langle \Phi | \mathbf{L} | \Psi \rangle^*$$

Sprawdźmy, czy operatory **X** i **D** są hermitowskie. Przypomnijmy, że

$$\mathbf{X}\psi(x) = x\psi(x)$$

Używając wzoru na iloczyn skalarny, równania 8.2, możemy napisać

$$\langle \Psi | \mathbf{L} | \Phi \rangle = \int \psi^*(x) x \varphi(x) dx$$

i

$$\langle \Phi | \mathbf{L} | \Psi \rangle = \int \varphi^*(x) x \psi(x) dx$$

Ponieważ *x* przyjmuje wartości rzeczywiste, łatwo sprawdzić, że każda z całek jest zespolonym sprzężeniem drugiej, a więc operator **X** jest hermitowski.

A co można powiedzieć o operatorze **D**? W tym wypadku oba wyrażenia to odpowiednio

$$\langle \Psi | \mathbf{D} | \Phi \rangle = \int \psi^*(x) \frac{d\phi(x)}{dx} dx$$

(8.7)

i

$$\langle \Phi | \mathbf{D} | \Psi \rangle = \int \varphi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx$$

(8.8)

Aby stwierdzić, czy **D** jest operatorem hermitowskim, należy porównać ze sobą te dwie całki i sprawdzić, czy jedna jest sprzężeniem zespolonym drugiej. Na pierwszy rzut oka nie wydaje się to oczywiste. Sztuczka polega na scałkowaniu drugiego wyrażenia przez części. Jak wyjaśniliśmy wcześniej, całkowanie przez części pozwala nam przenieść różniczkowanie z jednego czynnika podcałkowego iloczynu do drugiego, o ile tylko jednocześnie zmienimy znak na przeciwny. Tak więc całkę w równaniu 8.8 możemy przepisać jako

$$\langle \Phi | \mathbf{D} | \Psi \rangle = -\int \psi(x) \frac{d\varphi^*(x)}{dx} dx$$

(8.9)

Teraz wystarczy, że porównamy ze sobą wyrażenia z równań 8.7 i 8.9, co okazuje się dość łatwe. Z uwagi na znak minusa powinno być jasne, że z pewnością *nie* są one swoimi wzajemnymi sprzężeniami zespolonymi. Wiąże je za to relacja

$$\langle \Psi | \mathbf{D} | \Phi \rangle = -\langle \Phi | \mathbf{D} | \Psi \rangle^*$$

zasadniczo odmienna od tej, której poszukiwaliśmy. W odróżnieniu od operatora **X** operator **D** nie jest hermitowski. Spełnia on za to równość

$$\mathbf{D}^\dagger = -\mathbf{D}$$

Operator mający tę własność nazywamy *antyhermitowskim*.

Chociaż operatory hermitowskie i antyhermitowskie w pewnym sensie stanowią swoje przeciwieństwa, bardzo łatwo przejść od jednego do drugiego. Wystarczy pomnożyć odpowiedni operator przez liczbę urojoną, *i* albo *–i*. Wobec tego możemy wykorzystać **D** do skonstruowania operatora, który jest hermitowski, a mianowicie

$$-i\hbar\mathbf{D}$$

Jeśli zbadamy działanie tego nowego operatora hermitowskiego na funkcje, przekonamy się, że

$$-i\hbar\mathbf{D}\,\psi(x) = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}$$

(8.10)

Zapamiętaj ten wzór. Wkrótce odegra on fundamentalną rolę w zdefiniowaniu bardzo istotnej własności cząstek – ich pędu.

8.2 STAN CZĄSTKI

W mechanice klasycznej pojęcie „stan układu" oznacza całość wiadomości, jakie są potrzebne do przewidzenia przyszłości układu, jeśli znamy działające nań siły. Oczywiście w szczególności określa to położenia wszystkich cząstek składających się na układ, a także ich pędy. Z klasycznego punktu widzenia położenia i pędy w danym momencie to całkowicie niezależne od siebie zmienne. Na przykład dla cząstki o masie *m* poruszającej się wzdłuż jednowymiarowej osi *x* stan układu w danej chwili opisuje para (*x*, *p*). Współrzędna *x* odpowiada położeniu cząstki, a $p = m\dot{x}$ to jej pęd. Razem zmienne te definiują przestrzeń fazową układu. Jeśli oprócz tego znamy siłę działającą na cząstkę jako funkcję jej położenia, równania Hamiltona pozwalają nam obliczyć położenia i pędy w dowolnej chwili w przyszłości. Definiują one ewolucję czasową w przestrzeni fazowej.

Biorąc to pod uwagę, można by zgadywać, że kwantowy stan cząstki powinien być kombinacją liniową stanów bazowych indeksowanych położeniem i pędem:

$$|x, p\rangle$$

Funkcja falowa byłaby wówczas funkcją obu zmiennych:

$$\psi(x,p) = \langle x, p | \Psi \rangle$$

Takie stwierdzenie okazuje się jednak błędne. Przekonaliśmy się już wcześniej, że wartości, które mogą być jednocześnie poznawalne w fizyce klasycznej, tracą tę własność w mechanice kwantowej. Przykładem są choćby różne składowe spinu, powiedzmy σ_z i σ_x. Nie sposób poznać jednocześnie obu składowych, a więc nie istnieją stany, w których ustalone są wartości obydwu z nich. To samo jest prawdą dla *x* i *p*: ustalenie obu tych wartości okazuje się nadmiernym wymaganiem. Niezależnie od tego, czy mówimy o spinach (σ_z, σ_x) czy o położeniach i pędach (*x, p*), ta niezgodność w ostatecznym rozrachunku jest po prostu faktem obserwowanym w eksperymentach.

Czego można się dowiedzieć o cząstce znajdującej się na osi *x*, jeśli nie da się ustalić wartości *x* i *p*? Odpowiedź brzmi: można poznać *x* **albo** *p*; matematyczny opis operatorów położenia i pędu pokazuje, że nie komutują one ze sobą. Chciałbym podkreślić jednak, że nie dało się tego w żaden sposób przewidzieć z góry; wymagało to głębokiej analizy wyników eksperymentalnych uzyskanych w ciągu wielu dziesięcioleci.

Skoro położenie cząstki to obserwabla, musi istnieć odpowiadający jej operator hermitowski. Oczywistym kandydatem na ten operator jest **X**. Pierwszy krok na drodze do zrozumienia kluczowego związku między intuicyjnym pojęciem położenia a operatorem **X** polega na wyznaczeniu wektorów własnych i wartości własnych **X**. Wartości własne to potencjalne wartości położenia, które można zaobserwować, a wektory własne odpowiadają stanom, w których położenie jest dobrze określone.

8.2.1 WARTOŚCI WŁASNE I WEKTORY WŁASNE POŁOŻENIA

Kolejne pytanie jest dość oczywiste: jakie są możliwe wyniki pomiaru **X** i dla jakich stanów operator ten ma ściśle określoną (dającą się przewidzieć) wartość? Inaczej mówiąc, jakie są jego wartości i wektory własne? Zaczniemy od **X**. Równanie na jego wartości własne ma postać

$$\mathbf{X}|\Psi\rangle = x_0|\Psi\rangle$$

gdzie wartość własna została oznaczona przez x_0. W języku funkcji falowych wyraża się ono następująco:

$$x\psi(x) = x_0\psi(x)$$

(8.11)

Ostatnie równanie wygląda dość dziwnie. Jak *x* pomnożone przez jakąś funkcję może być równe tej samej funkcji? Na pierwszy rzut oka wydaje się to niemożliwe. Spróbujmy jednak zbadać problem dokładniej. Równanie 8.11 możemy przepisać w postaci

$$(x - x_0)\psi(x) = 0$$

Oczywiście jeśli iloczyn jest równy zeru, to przynajmniej jeden z czynników musi być równy zeru. Drugi czynnik może jednak być wtedy różny od zera. Tak więc jeśli $x \neq x_0$, to $\psi(x) = 0$. To bardzo mocny warunek. Mówi on, że dla danej wartości własnej x_0 funkcja $\psi(x)$ może być różna od zera co najwyżej w jednym punkcie, a mianowicie w

$$x = x_0.$$

Dla zwykłej funkcji ciągłej warunek ten oznaczałby wylądowanie w ślepym zaułku: żadna rozsądna funkcja nie może być równa zeru

wszędzie oprócz jednego punktu, w którym przyjmowałaby niezerową wartość. Tymczasem właśnie tak zachowuje się funkcja delta Diraca

$$\delta(x - x_0).$$

Oznacza to więc, że każda liczba rzeczywista x_0 jest wartością własną **X**, a odpowiednie wektory własne to funkcje (zwykle nazywamy je *funkcjami własnymi*) skoncentrowane w nieskończony sposób w $x = x_0$. Znaczenie tego stwierdzenia jest oczywiste: funkcje falowe

$$\psi(x) = \delta(x - x_0)$$

odpowiadają stanom, w których cząstka jest zlokalizowana dokładnie w punkcie x_0 na osi x.

Wszystko to wydaje się bardzo sensowne: funkcja falowa reprezentująca cząstkę, o której wiemy, że znajduje się w punkcie x_0, jest równa zeru wszędzie poza x_0. Jak mogłoby być inaczej? Nadal jednak powinniśmy się cieszyć, że matematyka potwierdza tę intuicję.

Rozważmy iloczyn skalarny stanu $|\Psi\rangle$ i stanu własnego położenia, $|x_0\rangle$:

$$\langle x_0 | \Psi \rangle$$

Dzięki wykorzystaniu równania 8.2 otrzymujemy

$$\langle x_0 | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)\psi(x)\, dx$$

Definicja funkcji delta Diraca podana w równaniu 8.4 oznacza, że całka ta jest równa:

$$\langle x_0 | \Psi \rangle = \psi(x_0)$$

(8.12)

Ponieważ równanie to jest prawdziwe dla dowolnego x_0, możemy opuścić indeks dolny i zapisać ogólne równanie

$$\langle x | \Psi \rangle = \psi(x)$$

(8.13)

Inaczej mówiąc, funkcja falowa $\psi(x)$ cząstki poruszającej się w kierunku x to projekcja wektora stanu |ψ na wektory własne położenia. Będziemy też nazywać $\psi(x)$ *funkcją falową w reprezentacji położenia*.

8.2.2 PĘD I JEGO WEKTORY WŁASNE

Pojęcie położenia odpowiada naszej intuicji; z pędem jest inaczej, szczególnie w mechanice kwantowej. Związek między operatorem, który będziemy utożsamiać z pędem, a dobrze znaną klasyczną koncepcją masy pomnożonej przez prędkość wyjaśni się dopiero później, ale już teraz obiecuję, że na pewno do tego wrócimy.

Na razie zajmiemy się abstrakcyjnym, matematycznym podejściem. Operator pędu w mechanice kwantowej oznacza się symbolem **P** i definiuje przy użyciu operatora –i**D**:

$$-i\mathbf{D} = -i\frac{d}{dx}$$

Jak zobaczyliśmy wcześniej w równaniu 8.10, czynnik i jest potrzebny, aby rozważany operator był hermitowski.

Moglibyśmy po prostu zdefiniować **P** jako $-i\mathbf{D}$, ale w takim razie natknęlibyśmy się na problemy później, kiedy próbowalibyśmy znaleźć związek między tymi koncepcjami a pojęciami fizyki klasycznej. Powód powinien być widoczny już teraz – nie pasowałyby do siebie odpowiednie wymiary. W fizyce klasycznej jednostki pędu powstają w wyniku pomnożenia masy przez prędkość – inaczej mówiąc, jako masa pomnożona przez długość podzielona przez czas (*ML/T*). Z kolei operator **D** odpowiada jednostkom będącym odwrotnością długości, czyli 1*/L*. Rozwiązanie leży w użyciu stałej Plancka $\hbar$, której jednostki to ML^2/T. Poprawny związek łączący **P** z **D** wygląda więc następująco:

$$\mathbf{P} = -i\hbar\mathbf{D}$$

(8.14)

co w działaniu na funkcje falowe daje

$$\mathbf{P}\psi(x) = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}$$

(8.15)

Fizycy kwantowi często używają jednostek, dla których $\hbar$ to po prostu 1, by uprościć postać otrzymywanych równań. Chociaż jest to bardzo kuszące, tu nie będziemy tak robić.

Wyznaczmy teraz wektory i wartości własne **P**. W abstrakcyjnej notacji wektorowej równanie na wartości własne to

$$\mathbf{P}\left|\Psi\right\rangle = p\left|\Psi\right\rangle$$

(8.16)

gdzie symbol *p* oznacza wartość własną **P**. Równanie 8.16 można wyrazić też w języku funkcji falowych. Korzystając z utożsamienia

$$\mathbf{P} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

możemy je zapisać jako

$$-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} = p\psi(x)$$

albo

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{ip}{\hbar}\psi(x)$$

Z podobnym równaniem spotkaliśmy się już wcześniej. Jego rozwiązanie to funkcja wykładnicza:

$$\psi_p(x) = Ae^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

Indeks *p* ma nam przypominać, że *ψp*(*x*) to wektor własny **P** o konkretnej wartości własnej *p*. To funkcja zmiennej *x*, ale oznaczamy ją wartością własną **P**.

Stała *A* pojawiająca się przed eksponentem nie jest wyznaczona przez równanie na wektor własny. To nic nowego: odpowiednie równanie nigdy nie mówi nam, jak ma wyglądać normalizacja funkcji falowej. Ogólna zasada każe nam dobrać stałą, tak by funkcja falowa dawała całkowite prawdopodobieństwo równe 1. Przykładem, który omawialiśmy już w rozdziale 2.3, jest wektor własny składowej *x* spinu:

$$|P\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

Czynnik $1/\sqrt{2}$ odpowiada właśnie za to, by całkowite prawdopodobieństwo wynosiło 1.

Normalizowanie wektorów własnych **P** to nieco subtelniejsza operacja, ale ostateczny wynik jest prosty. Czynnik *A* okazuje się tylko nieco bardziej skomplikowany niż w wypadku spinu. Aby oszczędzić trochę czasu, podam od razu wynik, a zostawię ci na później udowodnienie, że wygląda on właśnie tak. Prawidłowy czynnik to $A = 1/\sqrt{2\pi}$. Tak więc

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

(8.17)

Równania 8.13 i 8.17 pokazują nam coś interesującego. Iloczyn skalarny wektora własnego położenia $|x\rangle$ i wektora własnego pędu $|p\rangle$ ma bardzo prostą, symetryczną postać:

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-ipx}{\hbar}}$$

(8.18)

Drugie z równań to po prostu sprzężenie zespolone pierwszego. Wyniki te łatwo sprawdzić, jeśli pamiętasz, że $|x\rangle$ reprezentuje funkcja delta. Zanim przejdziemy dalej, chciałbym zwrócić uwagę na dwa ważne punkty:

1. Równanie 8.17 przedstawia funkcję własną pędu w bazie położenia. Inaczej mówiąc, chociaż występująca w nim funkcja reprezentuje stan własny pędu, to jest funkcją zmienną *x*, a nie (przynajmniej nie w jawny sposób) zmiennej *p*.

2. Symbolu ψ używaliśmy na oznaczenie stanów własnych zarówno położenia, jak i pędu. Matematykom mogłoby się nie spodobać stosowanie tego samego oznaczenia na dwie różne funkcje, ale fizycy robią to bez przerwy. Symbol $\psi(x)$ przedstawia po prostu dowolną funkcję, którą zajmujemy się w danym momencie.

W tym momencie możemy zacząć się domyślać, dlaczego funkcję falową nazywa się funkcją falową. Powinniście zauważyć, że funkcje własne (funkcje falowe reprezentujące wektory własne) operatora pędu mają postać fal – ściśle mówiąc, fal sinusoidalnych i cosinusoidalnych. Co więcej, pojawił się już jeden z najbardziej fundamentalnych aspektów występującego w mechanice kwantowej dualizmu fala–cząstka. Długość fali funkcji

$$e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

jest zadana wzorem

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

ponieważ wartość funkcji nie zmienia się, jeśli do zmiennej x dodamy $\frac{2\pi\hbar}{p}$:

$$e^{\frac{ip\left(x+\frac{2\pi\hbar}{p}\right)}{\hbar}} = e^{\frac{ipx}{\hbar}} e^{2\pi i} = e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

Zatrzymajmy się na chwilę, by omówić istotność związku między pędem a długością fali. Nazwanie go „istotnym” to w pewnym sensie za mało: związek ten określił kierunek całej dwudziestowiecznej fizyki. W ciągu ostatnich stu lat fizycy zajmowali się przede wszystkim odkrywaniem praw rządzących światem mikroskopijnym. Oznaczało to głównie ustalanie, w jaki sposób obiekty są zbudowane z mniejszych części. Przykłady są oczywiste: cząsteczki składają się

z atomów; atomy z elektronów i jąder; jądra z protonów i neutronów; te ostatnie, subjądrowe cząstki, są zbudowane z kwarków i gluonów. Gra toczy się dalej, naukowcy wciąż szukają mniejszych i głębiej ukrytych tworów.

Wszystkie te obiekty są zbyt małe, by dostrzec je nawet przy użyciu najlepszych mikroskopów optycznych, nie mówiąc o gołym oku. Powód nie leży wyłącznie w tym, że nasze oczy nie są wystarczająco czułe. Ważniejsze jest to, że oczy i mikroskopy optyczne wykrywają wyłącznie widmo widzialne, składające się z fal o długościach przynajmniej kilka tysięcy większych od rozmiarów atomu. Ogólna zasada mówi, że nie można zaobserwować obiektów sporo mniejszych niż długość fali, której używa się, by na nie patrzeć. Z tego powodu historia dwudziestowiecznej fizyki składała się w dużej części z poszukiwania coraz to krótszych długości fali światła – czy też dowolnego innego rodzaju fal. W wykładzie 10 przekonamy się, że światło o danej długości fali składa się z fotonów, których pęd wiąże się z długością fali za pomocą wyrażenia

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

Wynika z tego, że do badania obiektów o coraz mniejszych rozmiarach potrzebne są fotony (czy też inne cząstki) o coraz większych pędach. Duży pęd z pewnością oznacza dużą energię. Właśnie dlatego odkrywanie mikroskopowych własności materii wymagało budowania coraz potężniejszych akceleratorów cząstek.

8.3 TRANSFORMATA FOURIERA I BAZA PĘDU

Funkcja falowa $\psi(x)$ odgrywa fundamentalną rolę w wyznaczaniu prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w położeniu x:

$$P(x) = \psi^*(x)\psi(x)$$

Jak się wkrótce przekonamy, żaden eksperyment nie może prowadzić jednocześnie do wyznaczenia zarówno położenia, jak i pędu. Jeśli jednak zrezygnujemy z dowiadywania się czegokolwiek o położeniu, możemy precyzyjnie zmierzyć pęd. Sytuacja odpowiada dość dokładnie tej ze składowymi *x* i *z* spinu. Każdą z tych wartości można zmierzyć, ale nigdy nie da się ich zmierzyć jednocześnie.

Jakie jest prawdopodobieństwo, że cząstka ma pęd *p*, jeśli zdecydujemy się go zmierzyć? Odpowiedź leży w bezpośrednim uogólnieniu zasad podanych w wykładzie 3. Prawdopodobieństwo tego, że pomiar pędu da wynik *p*, wynosi

$$P(p) = \left|\langle \mathbf{P} | \Psi \rangle\right|^2$$

(8.19)

Wielkość $\langle \mathbf{P} | \Psi \rangle$ nazywa się funkcją falową $|\Psi\rangle$ w *reprezentacji pędu*. Jest to rzecz jasna funkcja zmiennej *p* i oznacza się ją nowym symbolem:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle \mathbf{P} | \Psi \rangle$$

(8.20)

Powinno być teraz jasne, że wektor stanu można przedstawić na dwa sposoby. Jeden z nich opiera się na stosowaniu bazy położenia, a drugi na stosowaniu bazy pędu. Obie funkcje falowe: funkcja falowa położenia $\psi(x)$ i funkcja falowa pędu $\tilde{\psi}(p)$, przedstawiają ten sam wektor stanu $|\Psi\rangle$. Wynika z tego, że musi je łączyć jakaś transformacja, która pozwala na podstawie znajomości $\psi(x)$ wyznaczyć $\tilde{\psi}(p)$, i *vice versa*. Tak naprawdę każde z powyższych przedstawień jest transformatą Fouriera tego drugiego.

8.3.1 ROZKŁADANIE JEDYNKI

W tym wykładzie zobaczymy potęgę notacji bra–ket Diraca w upraszczaniu skomplikowanych rachunków. Najpierw przypomnijmy jedną z ważnych koncepcji przedstawionych we wcześniejszych wykładach. Przypuśćmy, że zdefiniowaliśmy ortonormalną bazę stanów za pomocą wektorów własnych pewnej obserwabli hermitowskiej. Oznaczmy wektory bazowe przez $|i\rangle$. W wykładzie 7 wyjaśniłem pewną użyteczną sztuczkę, teraz przekonamy się, jak bardzo jest ona przydatna. Nazywamy ją *rozkładaniem jedynki*. Sztuczka opisana równaniem 7.11 polega na zapisaniu operatora jednostkowego **I** (operatora, który w działaniu na dowolny wektor daje ten sam wektor) w postaci

$$\mathbf{I} = \sum_i |i\rangle\langle i|$$

Ponieważ zarówno pęd, jak i położenie są hermitowskie, każdy ze zbiorów wektorów $|x\rangle$ i $|p\rangle$ definiuje zbiór wektorów bazowych. Zastąpiwszy sumy całkowaniem, znajdujemy więc dwa sposoby na rozłożenie jedynki:

$$\mathbf{I} = \int dx |x\rangle\langle x|$$

(8.21)

i

$$\mathbf{I} = \int dp |p\rangle\langle p|$$

(8.22)

Załóżmy, że znamy funkcję falową abstrakcyjnego wektora $|\Psi\rangle$ w reprezentacji położenia. Na mocy definicji jest ona równa

$$\psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$$

(8.23)

Przypuśćmy, że chcemy teraz poznać funkcję falową $\tilde{\psi}(p)$ w reprezentacji pędu. Oto kolejne kroki, które doprowadzą nas do tego celu:

• Po pierwsze, korzystamy z definicji funkcji falowej w reprezentacji pędu:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\Psi\rangle$$

• Po drugie, między wektorami bra i ket umieszczamy operator jednostkowy w postaci danej przez równanie 8.21:

$$\tilde{\psi}(p) = \int dx \langle p|x\rangle\langle x|\Psi\rangle$$

• Wyrażenie $\langle x|\Psi\rangle$ to po prostu funkcja falowa $\psi(x)$, a $\langle p(x)$ jest zadane drugim z równań 8.18:

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-ipx}{\hbar}}$$

• Połączenie wszystkich tych faktów dowodzi, że

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi(x)$$

(8.24)

Ostatnie równanie pokazuje nam dokładnie, jak przekształcić daną funkcję falową z reprezentacji położenia do reprezentacji pędu. Do czego może się nam to przydać? Przypuśćmy, że znamy funkcję falową jakiejś cząstki w reprezentacji położenia, ale celem naszego eksperymentu jest pomiar pędu. Chcielibyśmy poznać prawdopodobieństwo zaobserwowania pędu *p*. Odpowiednia procedura polega na wyznaczeniu najpierw $\tilde{\psi}(p)$ przy użyciu równania 8.24, a następnie na obliczeniu prawdopodobieństwa

$$P(p) = \tilde{\psi}^*(p)\tilde{\psi}(p)$$

Równie łatwo przeprowadzić rozumowanie prowadzące w odwrotnym kierunku. Załóżmy, że znamy $\tilde{\psi}(p)$, a chcemy odtworzyć $\psi(x)$. Tym razem skorzystamy z równania 8.22 w celu wyrażenia rozkładu jedynki. Oto kolejne kroki (zauważ, że są one podejrzanie podobne do tych, które przedstawiliśmy wcześniej):

• Po pierwsze, korzystamy z definicji funkcji falowej w reprezentacji położenia:

$$\psi(x) = \langle x | \Psi \rangle$$

• Po drugie, między wektorami bra i ket umieszczamy operator jednostkowy w postaci danej przez równanie 8.22:

$$\psi(x) = \int dp \langle x | p \rangle \langle p | \Psi \rangle$$

• Wyrażenie $\langle p | \Psi \rangle$ to po prostu funkcja falowa $\tilde{\psi}(p)$, a $\langle x | p \rangle$ jest tym razem zadane pierwszym z równań 8.18:

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

• Połączenie wszystkich tych faktów pokazuje, że

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{\frac{ipx}{\hbar}} \tilde{\psi}(p)$$

Przyjrzyjmy się jeszcze raz dwóm równaniom opisującym przejścia od położenia do pędu i z powrotem. Zauważ, jak bardzo są one symetryczne. Jedyna asymetria polega na tym, że w jednym z nich pojawia się $e^{\frac{ipx}{\hbar}}$, a w drugim $e^{\frac{-ipx}{\hbar}}$:

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi(x)$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{\frac{ipx}{\hbar}} \tilde{\psi}(p)$$

(8.25)

Związek między reprezentacjami położenia i pędu opisany równaniami 8.25 polega na tym, że odpowiednie funkcje falowe są swoimi wzajemnymi *transformatami Fouriera*. Tak naprawdę równania te odgrywają fundamentalną rolę w gałęzi matematyki nazywanej analizą fourierowską. Chciałbym, żebyście zwrócili uwagę na to, jak łatwo było je wyprowadzić, korzystając z eleganckiej notacji Diraca.

8.4 KOMUTATORY I NAWIASY POISSONA

Wcześniej, w wykładzie 4, sformułowaliśmy dwie ważne reguły dotyczące komutatorów. Pierwsza wiązała się z relacją między mechaniką klasyczną a kwantową, druga zaś z nieoznaczonością. Ten, bardzo długi już, wykład zakończę, pokazując, co te reguły mają wspólnego z operatorami **X** i **P**.

Zaczniemy od omówienia związku między komutatorami a fizyką klasyczną. Jak może pamiętasz, już wcześniej odkryliśmy, że komutatory są bardzo podobne do klasycznych nawiasów Poissona. Formalnie podobieństwo to opisuje równanie 4.21. Jeśli wstawimy do niego symbole operatorów **L** i **M**, których używaliśmy w tym wykładzie, dostaniemy

$$\left[\mathbf{L},\mathbf{M}\right] \Leftrightarrow i\hbar\{L,M\}$$

(8.26)

co powinno nam przypomnieć, że kwantowe równania ruchu wyglądają prawie tak jak ich klasyczne odpowiedniki. Sugeruje to, że warto obliczyć komutator obserwabli **X** i **P**. Na szczęście okazuje się to dość proste.

Najpierw sprawdźmy, co powstaje w wyniku działania iloczynu **XP** na dowolną funkcję falową $\psi(x)$. Na podstawie równań 8.5 i 8.15 możemy napisać

$$\mathbf{X}\psi(x) = x\psi(x)$$

$$\mathbf{P}\psi(x) = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}$$

Te dwa równania pozwalają nam wyznaczyć wynik działania **XP** na $\psi(x)$:

$$\mathbf{XP}\psi(x) = -i\hbar x\frac{d\psi(x)}{dx}$$

(8.27)

Teraz spróbujmy wykonać podobne obliczenia, zamieniając kolejność **X** z **P**:

$$\mathbf{PX}\psi(x) = -i\hbar\frac{d(x\psi(x))}{dx}$$

Aby uprościć ostatnie wyrażenie, korzystamy ze standardowej zasady obliczania pochodnej iloczynu $x\psi(x)$. Daje ona

$$\mathbf{PX}\psi(x) = -i\hbar x\frac{d\psi(x)}{dx} - i\hbar\psi(x)$$

(8.28)

W kolejnym kroku odejmujemy równanie 8.28 od równania 8.27, by się przekonać, jak komutator działa na funkcję falową:

$$[\mathbf{X},\mathbf{P}]\psi(x) = \mathbf{XP}\psi(x) - \mathbf{PX}\psi(x)$$

czyli

$$[\mathbf{X},\mathbf{P}]\psi(x) = i\hbar\psi(x)$$

Inaczej mówiąc, kiedy komutator [**X**, **P**] działa na dowolną funkcję falową *ψ(x)*, jedyne, co się dzieje, to mnożenie $\psi(x)$ przez liczbę $i\hbar$. Możemy to zapisać następująco:

$$[\mathbf{X},\mathbf{P}] = i\hbar$$

(8.29)

Ten ostatni fakt okazuje się bardzo ważny. To, że **X** i **P** nie komutują ze sobą, jest kluczowe dla zrozumienia, dlaczego nie da się ich jednocześnie zmierzyć. Sprawy przybierają jeszcze ciekawszy obrót, gdy porównamy to równanie z równoważnością 8.26, pokazującą, jak komutatory są związane z klasycznymi nawiasami

Poissona. W istocie równanie 8.29 mówi, że odpowiedni klasyczny nawias Poissona ma postać

$$\{x, p\} = 1$$

Ta równość to właśnie klasyczny związek między współrzędnymi a ich sprzężonymi pędami (zob. tom I, wykład 10, równanie 8). W ostatecznym rozrachunku to właśnie ta relacja wyjaśnia związek między kwantowym pojęciem pędu a jego klasycznym odpowiednikiem.

Korzystając z ogólnej zasady nieoznaczoności przedstawionej w wykładzie 5, zastosowanej do konkretnego przypadku

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar$$

otrzymujemy

$$\Delta\mathbf{X}\Delta\mathbf{P} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Wrócimy do tego w następnym wykładzie.

Przypomnijmy teraz drugą zasadę dotyczącą komutatorów. W wykładzie 4 dowiedzieliśmy się, że dwie obserwable **L** i **M** nie mogą zostać wyznaczone jednocześnie, o ile ze sobą nie komutują. Jeśli ich komutator jest różny od zera, to nie da się zmierzyć **L**, nie wpływając tym samym na pomiar **M**. Znalezienie jednoczesnych wektorów własnych dwóch niekomutujących ze sobą obserwabli okazało się niemożliwe, co z kolei doprowadziło nas do ogólnej zasady nieoznaczoności.

8.5 ZASADA NIEOZNACZONOŚCI HEISENBERGA

A teraz, panie i panowie, przyszła pora na to, na co wszyscy czekali. Po długim wyczekiwaniu spotkamy *zasadę nieoznaczoności Heisenberga*. To jeden z najsłynniejszych wyników mechaniki kwantowej: nie tylko mówi on, że położenia i pędu cząstki nie da się zmierzyć jednocześnie, ale nakłada też precyzyjne, ilościowe ograniczenie na ich wspólną nieoznaczoność. Proponuję, byście przed przejściem dalej powtórzyli sobie wiadomości z wykładu 5, w którym wyjaśniłem ogólną zasadę nieoznaczoności. Cała poważna praca została wykonana wtedy, teraz możemy już spijać śmietankę.

Jak się już przekonaliśmy, ogólna zasada nieoznaczoności nakłada ograniczenie ilościowe na jednoczesne nieoznaczoności obserwabli **A** i **B**. Fakt ten został wyrażony precyzyjnie w nierówności 5.13:

$$\Delta\mathbf{A}\Delta\mathbf{B} \geq \frac{1}{2}\left|\langle\Psi|[\mathbf{A},\mathbf{B}]|\Psi\rangle\right|$$

Zastosujmy teraz tę zasadę bezpośrednio do operatorów **X** i **P**. W tym wypadku komutator to po prostu liczba, a więc jego wartość oczekiwaną stanowi właśnie ta sama liczba. Zastępując **A** i **B** operatorami **X** i **P,** dostajemy

$$\Delta\mathbf{X}\Delta\mathbf{P} \geq \frac{1}{2}\left|\langle\Psi|[\mathbf{X},\mathbf{P}]|\Psi\rangle\right|$$

a zastąpienie [**X**, **P**] wyrażeniem $i\hbar$ daje

$$\Delta\mathbf{X}\Delta\mathbf{P} \geq \frac{1}{2}\left|i\hbar\langle\Psi|\Psi\rangle\right|$$

Ostatecznie, uwzględniając równość $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$, mamy

$$\Delta\mathbf{X}\Delta\mathbf{P} \geq \frac{1}{2}\hbar$$

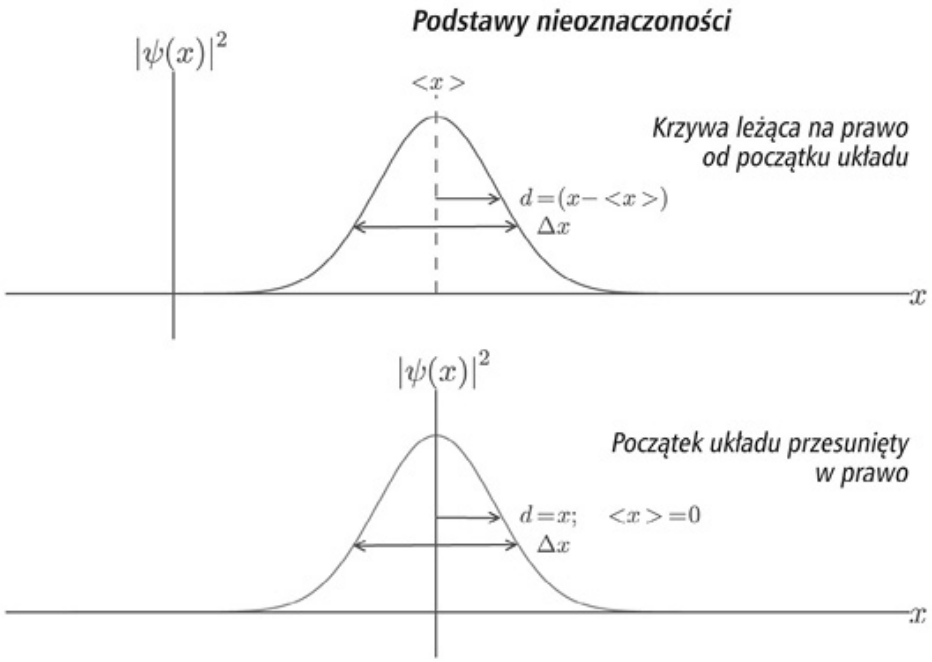
Nie istnieje żaden eksperyment, który mógłby pokonać to ograniczenie. Możesz starać się z całych sił wyznaczyć położenie i pęd cząstki w weryfikowalny, powtarzalny sposób, ale niezależnie od tego, jak bardzo będziesz uważny, iloczyn nieoznaczoności położenia i pędu nigdy nie stanie się mniejszy niż $\frac{1}{2}\hbar$.

W podrozdziale 8.2.1 dowiedzieliśmy się, że funkcja falowa stanu własnego **X** jest skoncentrowana w dużym stopniu w otoczeniu pewnego punktu x_0; w takim stanie własnym również prawdopodobieństwo jest idealnie zlokalizowane. Natomiast prawdopodobieństwo $P(x)$ dla stanu własnego pędu rozkłada się równomiernie po całej osi x. Aby się o tym przekonać, rozważmy funkcję falową z równania 8.17 i pomnóżmy ją przez jej sprzężenie zespolone:

$$\psi_p^*(x)\psi_p(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-ipx}{\hbar}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}\right) = \frac{1}{2\pi}$$

Wynik jest idealnie jednostajny, wierzchołki nie występują w żadnym punkcie osi x. Wyraźnie widać, że w stanie o określonym pędzie położenie staje się całkowicie nieokreślone.

Ilustracja 8.2 przedstawia definicję nieoznaczenia dla zmiennej położenia x. Górna połowa ilustracji pokazuje, że nieoznaczoność Δx mierzy, jak szeroko rozkłada się funkcja względem swojej wartości średniej x. Symbol d oznacza odchylenie pojedynczego punktu od x; może on przyjmować dodatnie albo ujemne wartości. Nieoznaczoność Δx powstaje w wyniku uśrednienia po wszystkich wartościach przyjmowanych przez d i charakteryzuje funkcję globalnie. Aby uniknąć wzajemnego kasowania się przez dodatnie i ujemne wartości d, przed uśrednieniem są one podnoszone do kwadratu.



Ilustracja 8.2. Podstawy nieoznaczoności. Góra: <x> leży na prawo od początku układu. Odchylenia d mogą być dodatnie albo ujemne. Globalna nieoznaczoność Δx (>0) zostaje wyznaczona jako wartość średnia d^2. Dół: początek układu przesunięto w prawo, <x> = 0. Wartość Δx pozostaje taka sama.

Dolna połowa ilustracji pokazuje, jak można uprościć rachunki, przesuwając początek układu współrzędnych tak, by na osi *x* odpowiadał on wartości *x*. Wartość liczbowa Δ*x* nie zmienia się w wyniku tego przesunięcia.

WYKŁAD 9

Dynamika cząstek

Art i Lenny spodziewali się, że „U Hilberta" coś się będzie działo. Wszystkie wektory stanu pozostawały jednak bez ruchu – niczym zamienione w kamień.
– Ależ tu nudno, Art. Czy tu się nigdy nic nie dzieje? – zapytał Lenny. – Hilbert, czemu nic się tu nie rusza z miejsca?
– Och, nie ma się czym martwić. Wszystko się zmieni, kiedy tylko pojawi się hamiltonian.
– Hamiltonian? Wygląda na to, że niezły z niego operator...

9.1 PROSTY PRZYKŁAD

Pierwsze dwa tomy serii „Teoretyczne minimum" skupiają się przede wszystkim na dwóch pytaniach. Pierwsze brzmiało: co rozumiemy przez układ i jak opisujemy jego stany w danym momencie? Jak się już przekonaliśmy, odpowiedzi klasyczne i kwantowe bardzo się od siebie różnią. Klasyczna przestrzeń fazowa – przestrzeń współrzędnych i pędów – zostaje w teorii kwantowej zastąpiona przestrzenią liniową wektorów stanu.

Drugie z poważnych pytań brzmi: jak stany zmieniają się w czasie? Zarówno w fizyce klasycznej, jak i w mechanice kwantowej odpowiedź to: *zgodnie z minus pierwszym prawem.* Inaczej mówiąc, stany zmieniają się w taki sposób, by informacja i możliwość ich odróżnienia nigdy nie zostały wymazane. W mechanice klasycznej

zasada ta doprowadziła nas do równań Hamiltona i twierdzenia Liouville'a. Wcześniej, w wykładzie 4, wyjaśniłem, jak w mechanice kwantowej odpowiednie prawo pociąga za sobą regułę unitarności, która z kolei implikuje ogólne równanie Schrödingera.

Wykład 8 dotyczył w całości pierwszego pytania: jak opisać stan cząstki? Teraz, w wykładzie 9, dotarliśmy do drugiego, które możemy przeformułować następująco: *jak w mechanice kwantowej cząstki się poruszają*?

W wykładzie 4 przedstawiłem podstawowe zasady rządzące zmianami stanów kwantowych w miarę upływu czasu. Głównym elementem tych zasad jest hamiltonian *H*, który zarówno w mechanice klasycznej, jak i kwantowej reprezentuje całkowitą energię układu. W mechanice kwantowej hamiltonian determinuje ewolucję układu w czasie poprzez zależne od czasu równanie Schrödingera:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \mathbf{H}|\Psi\rangle$$

(9.1)

Ten wykład w całości będzie poświęcony *oryginalnemu równaniu Schrödingera* – temu, które zapisał Schrödinger, by opisać cząstkę kwantowomechaniczną. Oryginalne równanie Schrödingera to szczególny przypadek równania 9.1.

Ruchem zwykłej (nierelatywistycznej) cząstki w mechanice klasycznej rządzi hamiltonian równy sumie energii kinetycznej i energii potencjalnej. Wkrótce zajmiemy się kwantową wersją takiego hamiltonianu, ale najpierw przyjrzyjmy się jeszcze innej sytuacji.

Zaczniemy od najprostszego hamiltonianu, jaki sobie umiem wyobrazić. Załóżmy, że operator hamiltonianu **H** jest równy operatorowi pędu **P** pomnożonemu przez pewną stałą:

$$\mathbf{H} = c\mathbf{P}$$

(9.2)

Tego przykładu nie można znaleźć w wielu książkach, chociaż okazuje się naprawdę pouczający. Stała c to pewna ustalona liczba. Czy $c\mathbf{P}$ to rozsądny hamiltonian dla cząstki? Tak, a za chwilę przekonamy się, jaką cząstkę opisuje. Na razie zauważmy tylko, że równanie 9.2 różni się od tego, czego moglibyśmy oczekiwać od cząstki nierelatywistycznej. Inaczej mówiąc, nie pojawia się w nim $\mathbf{P}^2/2m$. Warto zająć się najpierw tym prostym przykładem, by zrozumieć, jak działają nasze narzędzia matematyczne.

Jak opisać ten przykład w języku funkcji falowych $\psi(x)$ w bazie położenia? Zaczniemy od wstawienia naszych operatorów do zależnego od czasu równania Schrödingera (równania 9.1):

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -ci\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}$$

Zwróć uwagę, że teraz zapisujemy ψ jako funkcję zmiennych x i t. Skrócenie czynników $i\hbar$ daje

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -c\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}$$

(9.3)

a to już całkiem proste równanie. Tak naprawdę jego rozwiązaniem jest dowolna funkcja wyrażenia $(x - ct)$. Przez „funkcję wyrażenia $(x - ct)$” rozumiem funkcję, która nie zależy osobno od x i od t, tylko od ich kombinacji, $(x - ct)$. Aby się przekonać, jak to działa, rozważ dowolną funkcję postaci $\psi(x - ct)$ i przyjrzyj się jej pochodnym. Jeśli policzysz pochodną cząstkową względem x, dostaniesz po prostu

$$\frac{\partial\psi(x-ct)}{\partial x}$$

ponieważ pochodna ($x - ct$) względem x to 1. Jeśli jednak policzysz pochodną cząstkową po t, otrzymasz

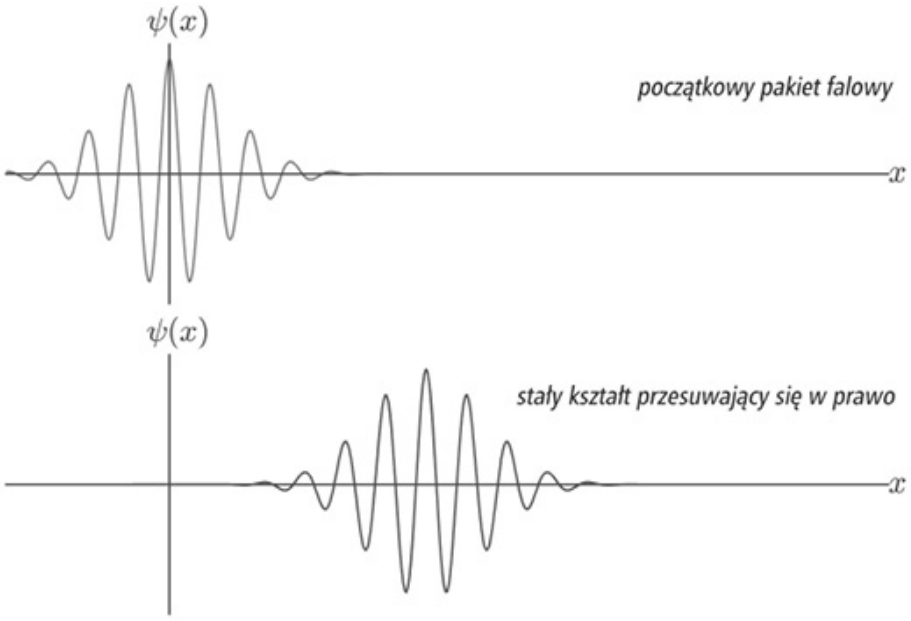
$$-c\frac{\partial\psi\left(x-ct\right)}{\partial t}$$

Widać, że taka kombinacja pochodnych spełnia równanie 9.3; tak więc dowolna funkcja podanej postaci jest rozwiązaniem równania Schrödingera.

Przyjrzyjmy się teraz zachowaniu funkcji $\psi(x - ct)$. Jak ona wygląda? Jak zmienia się w miarę upływu czasu? Przypuśćmy, że zaczniemy od obrazu sytuacji w chwili $t = 0$. Odpowiedni wykres możemy nazwać wykresem funkcji $\psi(x)$, gdyż mówi nam on, jak funkcja ψ wygląda w każdym punkcie przestrzeni w *określonej chwili* $t = 0$. Oczywiście nie interesuje nas całkowicie dowolna funkcja zależna od ($x - ct$). Chcemy, by całkowite prawdopodobieństwo

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\left(x\right)\,\psi\left(x\right)\,dx$$

było równe 1. Inaczej mówiąc, chcemy, by $\psi(x)$ zbiegała odpowiednio do zera w nieskończoności, tak by całka pozostawała skończona. Ilustracja 9.1 przedstawia szkic wykresu $\psi(x)$. W takiej sytuacji ma sens nazywanie funkcji $\psi(x)$ *pakietem falowym*. Teraz, kiedy opisaliśmy już obraz funkcji $\psi(x)$ w chwili $t = 0$, możemy się zastanowić, co stanie się, gdy zacznie biec czas. Kiedy wartość t rośnie, pakiet falowy utrzymuje taki sam kształt. Każdy element wykresu funkcji zespolonej $\psi(x, t)$ porusza się z jednakową prędkością c w prawo[37].



Ilustracja 9.1. Pakiet falowy o ustalonym kształcie poruszający się ze stałą prędkością c

Nazwę *c* nadałem naszej stałej nie bez powodu – symbolem *c* oznacza się często prędkość światła. Czy więc nasza cząstka to foton? Nie, tak naprawdę nie. Nasz opis hipotetycznej cząstki jest jednak całkiem bliski poprawnego opisu neutrina poruszającego się z prędkością światła. (Prawdziwe neutrina poruszają się z prędkością niemal niedostrzegalnie mniejszą od prędkości światła). Hamiltonian, którym się zajmujemy, dawałby bardzo dobry opis jednowymiarowego neutrina, gdyby nie jeden problem: cząstka opisywana naszą funkcją falową może poruszać się wyłącznie w prawo. Aby podać kompletny opis, należałoby dodać kolejną możliwość – pozwolić jej poruszać się również w lewo[38]!

Nasz podróżujący w prawo zakson[39] ma inną przedziwną cechę – jego energia może być dodatnia albo ujemna. Wynika to z faktu, że operator **P**, jako wektor, może przyjmować wartości dodatnie albo ujemne. Ogólnie mówiąc, energia cząstki o ujemnym pędzie będzie ujemna, a energia cząstki o dodatnim pędzie dodatnia. Nie będę tu omawiać tego faktu, wspomnę tylko, że problem ujemnych energii dla tego rodzaju cząstki został rozwiązany przez Diraca, który

opracował teoretyczne podstawy koncepcji antycząstek. Z naszego punktu widzenia można spokojnie zignorować ten problem i po prostu zaakceptować to, że energia cząstki może być dodatnia albo ujemna.

Ponieważ funkcja falowa naszej cząstki porusza się w ustalonym kierunku ściśle po osi *x*, podobnie jest z rozkładem prawdopodobieństwa. W związku z tym i wartość oczekiwana porusza się w ten sam sposób, czyli przesuwa się w prawo z prędkością *c*. Tak w skrócie wygląda mechanika kwantowa tego układu. Musimy jednak pamiętać o jeszcze innym fakcie. Kiedy stwierdziliśmy, że prędkość *c* to *stała*, nie żartowaliśmy. Nasza cząstka może znajdować się wyłącznie w stanie, w którym porusza się właśnie z tą konkretną prędkością. Nie może nigdy ani przyspieszyć, ani zwolnić.

Jak to się ma do klasycznego opisu podobnej cząstki? Zaczynając od identycznego hamiltonianu, fizyk klasyczny zapisałby po prostu równania Hamiltona. Dla $H = cP$ mają one następującą postać:

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{x}$$

i

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\dot{p}$$

Kiedy obliczymy odpowiednie pochodne cząstkowe, otrzymamy

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{x} = c$$

i

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\dot{p} = 0$$

Tak więc w klasycznym opisie naszej cząstki pęd jest zachowywany, a położenie przemieszcza się ze stałą prędkością *c*. W opisie kwantowomechanicznym cały rozkład prawdopodobieństwa i wartość oczekiwana przemieszczają się z prędkością *c*. Inaczej mówiąc, wartość oczekiwana położenia zachowuje się zgodnie z klasycznymi równaniami ruchu.

9.2 NIERELATYWISTYCZNE CZĄSTKI SWOBODNE

Wyłącznie bezmasowe cząstki mogą się poruszać z prędkością światła. Warto dodać, że wolno im to czynić tylko z taką prędkością. Wszystkie znane cząstki oprócz fotonów i grawitonów mają masę i mogą się przemieszczać z dowolną prędkością mniejszą od *c*. Kiedy poruszają się z prędkością dużo mniejszą od *c*, nazywa się je nierelatywistycznymi. Ich ruchem, przynajmniej z klasycznego punktu widzenia, rządzą wtedy zwykłe równania mechaniki newtonowskiej. Historycznie pierwsze zastosowanie mechaniki kwantowej dotyczyło ruchu cząstek nierelatywistycznych.

Wcześniej pokazałem (w wykładach 4 i 8), że nawiasy Poissona odgrywają w mechanice klasycznej tę samą rolę co komutatory w mechanice kwantowej. Zapisane przy użyciu tych pojęć klasyczne i kwantowe mechaniczne równania ruchu wyglądają niemal identycznie. W szczególności hamiltonian pojawia się w równaniach z komutatorami w takim samym kontekście jak w równaniach z nawiasami Poissona. Jeśli więc chcesz zapisać równania kwantowomechaniczne dla układu, dla którego znasz już fizykę klasyczną, rozsądnie jest spróbować klasycznego hamiltonianu, przedstawionego w postaci operatorowej.

Dla nierelatywistycznej cząstki swobodnej naturalny hamiltonian ma postać $p^2/2m$. Kiedy mówimy, że cząstka jest swobodna, chodzi nam o to, że nie działają na nią żadne siły, a więc możemy zignorować energię potencjalną. Obchodzi nas wyłącznie energia kinetyczna, zdefiniowana wzorem

$$T = \frac{1}{2}mv^2$$

Jak pewnie pamiętasz, pęd dla cząstki klasycznej to

$$p = mv$$

Hamiltonian to po prostu energia kinetyczna, którą możemy przedstawić jako wyrażenie zależne od pędu *p*. Prowadzi to do równości

$$H = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

opisującej hamiltonian klasycznej nierelatywistycznej cząstki swobodnej. W odróżnieniu od podróżującego w prawo zaksonu z poprzedniego przykładu, energia tej cząstki nie zależy od kierunku jej ruchu. Wynika to z faktu, że energia jest proporcjonalna do p^2, a nie do samego *p*. Zaczniemy więc nasze rozważania od cząstki, której energia to $p^2/2m$, i wyprowadzimy odpowiednie równanie Schrödingera (tak naprawdę będzie to właśnie oryginalne równanie podane przez Schrödingera) dla cząstki swobodnej.

Przeprowadzimy teraz rozumowanie podobne do tego przedstawionego w poprzednim przykładzie, wykorzystując hamiltonian do zapisania zależnego od czasu równania Schrödingera. Jak zwykle lewa strona równania to

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

Postać prawej strony wyprowadzimy, przepisując klasyczny hamiltonian – energię kinetyczną – jako operator. Klasyczna energia kinetyczna to

$$p^2/2m$$

W wersji kwantowej *p* zastępuje **P**:

$$\mathbf{H} = \mathbf{P}^2 / 2m$$

Jak należy rozumieć ostatni zapis? Wiemy już, że operator **P** definiuje się jako

$$\mathbf{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Kwadrat **P** to po prostu operator otrzymywany w wyniku zadziałania **P** dwukrotnie. Tak więc

$$\mathbf{P}^2 = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

czyli

$$\mathbf{P}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

i hamiltonian przybiera postać

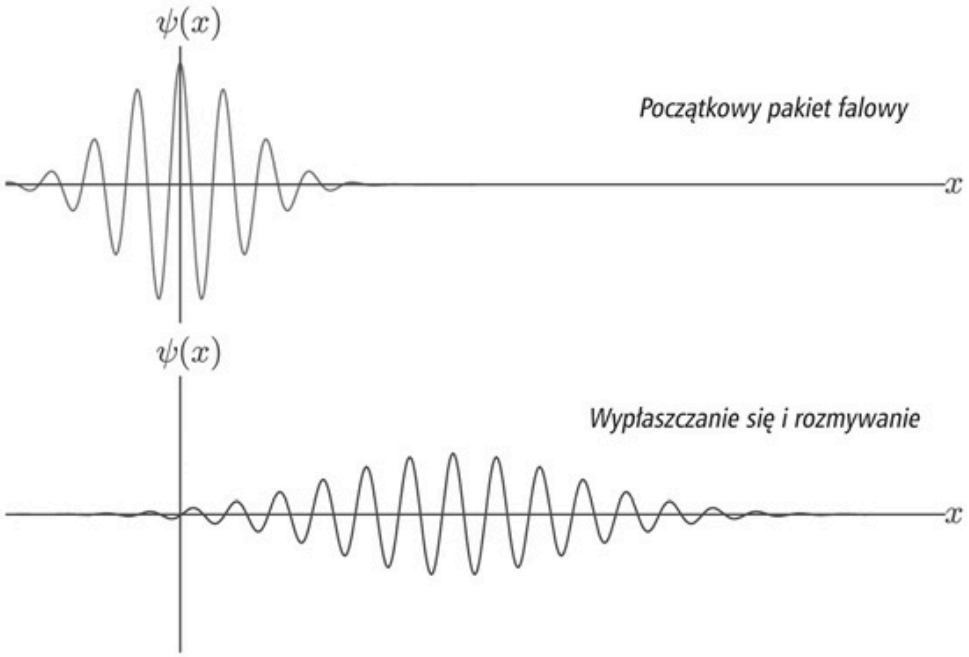
$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Wreszcie jeśli przyrównamy do siebie obie strony zależnego od czasu równania Schrödingera, otrzymamy

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

(9.4)

Tak właśnie wygląda tradycyjne równanie Schrödingera dla zwykłej cząstki nierelatywistycznej. Jest ono szczególnym rodzajem równania falowego, ale w odróżnieniu od poprzedniego przykładu fale o różnych długościach (i różnych pędach) poruszają się z różnymi prędkościami. Z uwagi na to funkcja falowa nie zachowuje stałego kształtu. W przeciwieństwie do funkcji falowej zaksonu w miarę upływu czasu rozmywa się ona i rozpada. Schematycznie przedstawia to ilustracja 9.2.



Ilustracja 9.2. Typowy pakiet falowy nierelatywistycznej cząstki swobodnej. Góra: początkowy pakiet falowy ma zwarty, wysoce zlokalizowany

charakter. Dół: w miarę upływu czasu pakiet falowy przemieszcza się w prawo i rozmywa.

9.3 RÓWNANIE SCHRÖDINGERA NIEZALEŻNE OD CZASU

Naszym celem jest teraz rozwiązanie zależnego od czasu równania Schrödingera dla nierelatywistycznych cząstek swobodnych. Najpierw musimy się jednak zająć wersją tego równania, która od czasu nie zależy. Odpowiada ona zasadniczo równaniu na wektory własne hamiltonianu,

$$H\left|\Psi\right\rangle = E\left|\Psi\right\rangle$$

zapisanemu bezpośrednio w języku funkcji falowej *ψ(x)*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi\left(x\right)}{\partial x^2} = E\psi\left(x\right)$$

(9.5)

Znalezienie kompletnego układu wektorów własnych spełniających to równanie nie jest szczególnie trudne. Tak naprawdę wystarczy rozważyć wektory własne pędu. Sprawdźmy jako potencjalne rozwiązanie funkcję

$$\psi\left(x\right) = e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

(9.6)

Policzenie pochodnych pokazuje, że jest ona faktycznie rozwiązaniem równania 9.5, jeśli tylko przyjmiemy, że

$$E = p^2 / 2m$$

(9.7)

Nie powinno nas to zdziwić – w końcu *E* w równaniu 9.5 odpowiada wartości własnej energii.

***

<u>Ćwiczenie 9.1. Wyprowadź równanie 9.7, wstawiając równanie 9.6 do równania 9.5.</u>

***

Jak przekonaliśmy się w rozdziale 4.13, każde rozwiązanie niezależnego od czasu równania Schrödingera pozwala nam skonstruować rozwiązanie, które od czasu zależy. W tym celu wystarczy pomnożyć rozwiązanie niezależne od czasu – w tym wypadku $e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ – przez $e^{\frac{iEt}{\hbar}} = e^{-i\frac{p^2 t}{2m\hbar}}$. Tak więc pełny układ rozwiązań można zapisać jako

$$\psi(x,t) = \exp \frac{i\left(px - \frac{p^2 t}{2m}\right)}{\hbar}$$

Dowolne rozwiązanie jest sumą (albo całką) rozwiązań przedstawionych powyżej:

$$\psi(x,t) = \int \tilde{\psi}(p) \left(\exp \frac{i\left(px - \frac{p^2 t}{2m}\right)}{\hbar} \right) dp$$

Teraz możemy zacząć od dowolnej funkcji falowej w chwili $t = 0$, znaleźć $\tilde{\psi}(p)$ za pomocą transformaty Fouriera i pozwolić jej ewoluować w czasie. Kształt rozwiązania będzie się zmieniać, ponieważ fale związane z różnymi wartościami *p* przemieszczają się z różnymi prędkościami. Jak jednak wkrótce zobaczymy, cały pakiet falowy będzie się poruszał z prędkością *<p/m>*, tak jak gdyby była to cząstka klasyczna.

Ta prosta postać ogólnego rozwiązania ma ważne zastosowanie. Niezależnie od innych faktów, mówi ona nam, że funkcja falowa w reprezentacji pędów zmienia się w czasie w bardzo prosty sposób:

$$\tilde{\psi}(p,t) = \tilde{\psi}(p) \exp \frac{i\left(px - \frac{p^2 t}{2m}\right)}{\hbar}$$

Inaczej mówiąc, w miarę upływu czasu zmienia się wyłącznie faza, a wartość bezwzględna pozostaje taka sama. To, co czyni ten fakt interesującym, to wniosek, że prawdopodobieństwo *P*(*p*) pozostaje cały czas identyczne. Wynika to oczywiście z zasady zachowania pędu, ale jest prawdą tylko wtedy, gdy na cząstkę nie działają żadne siły.

9.4 PRĘDKOŚĆ I PĘD

Na razie nie wyjaśniłem związku między operatorem **P** a klasycznym pojęciem pędu, czyli masą pomnożoną przez prędkość. Ostatnią relację można zapisać jako

$$v = p / m$$

(9.8)

Co mamy na myśli, mówiąc o prędkości cząstki w mechanice kwantowej? Najprostsza odpowiedź brzmi: chodzi o pochodną po czasie uśrednionego położenia $\langle \Psi | \mathbf{X} | \Psi \rangle$:

$$v = \frac{d \langle \Psi | \mathbf{X} | \Psi \rangle}{dt}$$

czy, konkretniej, w języku funkcji falowych:

$$v = \frac{d}{dt} \int \psi^* (x,t)\, x\, \psi (x,t)$$

Dlaczego wielkość $\langle \Psi | \mathbf{X} | \Psi \rangle$ zmienia się w miarę upływu czasu? Wynika to z tego, że ψ zależy od czasu. Wiemy dokładnie, jak wygląda ta zależność: rządzi nią zależne od czasu równanie Schrödingera. Moglibyśmy to wykorzystać, by obliczyć bezpośrednio, jak $\langle \Psi | \mathbf{X} | \Psi \rangle$ zmienia się w czasie. Wykonałem odpowiednie, dość męczące rachunki – i zabrało mi to kilka ładnych stron. Na szczęście abstrakcyjne metody, których nauczyłeś się w poprzednich wykładach, umożliwiają otrzymanie wyniku w dużo prostszy sposób. Tak naprawdę większość pracy wykonałem już w wykładzie 4. Zanim przejdziemy dalej, polecam ci powtórzenie sobie wiadomości z wykładu 4, a zwłaszcza z rozdziału 4.9, od początku aż do pojawienia się równania 4.17. Przypomnijmy, że równanie 4.17 ma postać:

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{L} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\mathbf{H}, \mathbf{L}] \rangle$$

Inaczej mówiąc, pochodna po czasie wartości oczekiwanej dowolnej obserwabli **L** jest dana przez wartość oczekiwaną komutatora hamiltonianu z **L** pomnożoną przez $i / \hbar$. Zastosowanie tej ogólnej zasady do prędkości v daje

$$v = \frac{i}{2m\hbar}\left\langle \left[\mathbf{P}^2, \mathbf{X}\right] \right\rangle$$

(9.9)

Teraz wystarczy już policzyć komutator $\mathbf{P}^2$ z **X**. Kilka prostych kroków prowadzi do równania

$$\left[\mathbf{P}^2, \mathbf{X}\right] = \mathbf{P}\left[\mathbf{P}, \mathbf{X}\right] + \left[\mathbf{P}, \mathbf{X}\right]\mathbf{P}$$

(9.10)

Jego poprawność można sprawdzić, rozpisując każdy z komutatorów i zauważając, że kilka czynników skraca się w oczywisty sposób.

***

Ćwiczenie 9.2. Udowodnij równanie 9.10, rozpisując osobno obie strony i porównując otrzymane wyniki.

***

W ostatnim kroku trzeba skorzystać ze standardowej relacji komutacyjnej

$$\left[\mathbf{P}, \mathbf{X}\right] = -i\hbar$$

Podstawienie tego wyniku do równania 9.10, a następnie do równania 9.9, pokazuje, że mamy

$$v = \frac{\left\langle \mathbf{P} \right\rangle}{m}$$

co można zapisać w łatwiejszy do skojarzenia sposób jako

$$\langle \mathbf{P} \rangle = mv$$

(9.11)

Udowodniliśmy właśnie to, na czym nam zależało: pęd jest równy masie pomnożonej przez prędkość, a mówiąc precyzyjniej, przeciętny pęd jest równy masie pomnożonej przez prędkość.

Aby lepiej zrozumieć, co to oznacza, załóżmy, że funkcja falowa ma postać pakietu falowego czy też dość wąskiego grzbietu. Wartość oczekiwana *x* znajdzie się w takim wypadku mniej więcej w centrum tego grzbietu. Równanie 9.11 mówi nam, że środek pakietu falowego przemieszcza się zgodnie z klasyczną regułą $p = mv$.

9.5 KWANTYZACJA

Zanim przejdziemy do rozważania sił w mechanice kwantowej, chciałbym zatrzymać się na chwilę i omówić to, co właśnie zrobiliśmy. Zaczęliśmy od dobrze znanego i godnego zaufania układu klasycznego – cząstki swobodnej – i przeprowadziliśmy jego *kwantyzację*. Odpowiednią procedurę można sformalizować następująco:

1. Zaczynamy od układu klasycznego. Oznacza to ustalenie układu współrzędnych *x* i pędów *p*. W naszym przykładzie mieliśmy do czynienia tylko z jedną współrzędną i jednym pędem, ale zastosowaną tam metodę łatwo uogólnić. Współrzędne i pędy występują w parach, x_i i p_i. Znamy też hamiltonian układu klasycznego, będący funkcją zmiennych *x* i *p*.
2. Zastępujemy klasyczną przestrzeń fazową przestrzenią wektorową stanów. W reprezentacji położenia elementami

przestrzeni stanów są funkcje falowe $\psi(x)$ zależne od współrzędnych – w ogólnym przypadku od wszystkich.

3. Zastępujemy współrzędne x_i i p_i operatorami $\mathbf{X}_i$ i $\mathbf{P}_i$. Każdy z operatorów $\mathbf{X}_i$ działa na funkcję falową, mnożąc ją przez x_i. Działanie operatorów $\mathbf{P}_i$ opisuje wzór:

$$\mathbf{P}_i \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$$

4. Po wykonaniu tych podstawień hamiltonian staje się operatorem, który można wykorzystać zarówno w zależnym od czasu, jak i w niezależnym od czasu równaniu Schrödingera. Równanie zależne od czasu mówi nam, jak funkcja falowa zmienia się w czasie. Z kolei postać niezależna od czasu pozwala znaleźć wektory własne i wartości własne hamiltonianu.

Opisana powyżej procedura kwantyzacji to metoda przekształcania klasycznych równań układu do równań kwantowych. Wykorzystywano ją już wielokrotnie, w gałęziach fizyki tak różnych jak badanie ruchu cząstek czy elektrodynamika kwantowa. Podjęto też liczne (nie do końca udane) próby kwantyzacji teorii grawitacji Einsteina. Jak zobaczyliśmy w jednym prostym przykładzie, metoda ta gwarantuje, że ruch wartości oczekiwanych jest silnie związany z ruchem w odpowiednim układzie klasycznym.

Wszystko to skłania nas do postawienia pytania typu „jajko czy kura”: co ma pierwotny charakter, teoria klasyczna czy teoria kwantowa? Czy logicznym punktem wyjścia dla fizyki powinna być mechanika klasyczna czy kwantowa? Myślę, że odpowiedź jest oczywista. Prawdziwy opis przyrody daje mechanika kwantowa. Mechanika klasyczna, choć piękna i elegancka, pozostaje tylko przybliżeniem. Z grubsza rzecz ujmując, pozostaje w mocy, gdy funkcje falowe utrzymują kształt pakietów. Czasami udaje się nam odgadnąć – a naprawdę chodzi tu właśnie o odgadnięcie – kwantową teorię układu dzięki kwantyzacji dobrze znanego układu

klasycznego. Nieraz taka metoda działa, czego przykładem jest kwantowy ruch elektronów, wydedukowany z klasycznej mechaniki cząstek. Inny przykład to elektrodynamika kwantowa wyprowadzona na podstawie równań Maxwella. Czasami jednak nie dysponujemy żadną klasyczną teorią, którą można by przyjąć za punkt wyjścia. Spinowi cząstki nie odpowiada żadne prawdziwe pojęcie klasyczne, a próby kwantyzacji ogólnej teorii względności należy zasadniczo uznać za nieudane. Teoria kwantowa odgrywa zapewne dużo bardziej fundamentalną rolę niż teoria klasyczna, którą należy ogólnie traktować tylko jako przybliżenie.

Mimo to nadal będę zajmował się kwantyzacją ruchu cząstek, tym razem biorąc pod uwagę również efekt działania sił.

9.6 SIŁY

Gdyby wszystkie cząstki były swobodne, świat wyglądałby bardzo nudno. Siły sprawiają, że z cząstkami zaczyna się dziać coś ciekawego – na przykład łączą się w atomy, cząsteczki, tabliczki czekolady czy czarne dziury. Siła działająca na dowolną ustaloną cząstkę jest równa sumie sił wywieranych na nią przez wszystkie inne cząstki we Wszechświecie. Zwykle zakładamy, że wiemy, co dzieje się z wszystkimi pozostałymi cząstkami, i przedstawiamy ich wpływ na badaną przez nas cząstkę przy użyciu funkcji opisującej energię potencjalną. Robimy tak zarówno w mechanice klasycznej, jak i kwantowej.

Funkcję energii potencjalnej oznacza się zwykle przez $V(x)$. W mechanice klasycznej jest ona związana z siłą działającą na cząstkę równaniem

$$F(x) = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

Jeśli ruch odbywa się w jednym wymiarze, pochodną cząstkową można zastąpić zwykłą pochodną, ale w dalszym ciągu będę używał tego samego oznaczenia. Kiedy powiążemy ostatnie równanie z drugą zasadą dynamiki Newtona, *F = ma*, otrzymamy

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

W mechanice kwantowej postępujemy inaczej: zapisujemy hamiltonian i rozwiązujemy równanie Schrödingera. Uwzględnienie w tej procedurze energii potencjalnej okazuje się bardzo proste. Energia potencjalna *V*(*x*) staje się operatorem **V**, który dodaje się do hamiltonianu.

Jakiego rodzaju operatorem jest **V**? Odpowiedź najprościej wyrazić w konkretnym języku funkcji falowych, a nie przez abstrakcyjne wektory bra i ket. Kiedy operator **V** działa na dowolną funkcję falową *ψ*(*x*), mnoży ją po prostu przez funkcję *V*(*x*):

$$\mathbf{V}\left|\Psi\right\rangle \rightarrow V\left(x\right)\psi\left(x\right)$$

Tak jak w mechanice klasycznej, jeśli uwzględni się siły, pęd cząstki przestaje być zachowywany. Tak naprawdę równania ruchu Newtona można zapisać w postaci

$$\frac{dp}{dt} = F$$

czyli

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

(9.12)

Reguły kwantyzacji każą nam dodać do hamiltonianu czynnik $\mathbf{V}(x)$[40]:

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \mathbf{V}(x)$$

(9.13)

i w oczywisty sposób zmodyfikować równanie Schrödingera:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi$$

$$E\psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi$$

(9.14)

Jakie ma to konsekwencje? Dodatkowy czynnik z pewnością wpływa na to, jak ψ zmienia się w czasie. Musi tak być, skoro średnie położenie pakietu falowego ma odpowiadać klasycznej trajektorii. Aby sprawdzić, czy nasze rozumowanie jest poprawne, przekonajmy się o tym bezpośrednio. Najpierw zastanówmy się, czy równanie 9.11 nadal pozostaje prawdziwe. Powinno tak być, bo związek między pędem a prędkością nie zależy od obecności sił.

Ponieważ do hamiltonianu został dodany nowy czynnik, nowy wyraz pojawi się też w komutatorze **X** i **H**. Ewentualnie mogłoby to zmienić wyrażenie opisujące prędkość w równaniu 9.9, ale nietrudno się przekonać, że w rzeczywistości tak się nie dzieje. Nowy wyraz zawiera komutator **X** z $\mathbf{V}(x)$. Operacje mnożenia przez x i mnożenia przez funkcję zależną od x komutują ze sobą. Inaczej mówiąc,

$$[\mathbf{X}, \mathbf{V}(x)] = 0$$

Tak więc związek między prędkością a pędem w mechanice kwantowej nie zależy od obecności sił, tak samo jak było to w mechanice klasycznej.

Ciekawsze pytanie brzmi następująco: czy potrafimy zrozumieć kwantową wersję drugiej zasady dynamiki Newtona? Jak stwierdziliśmy wcześniej w tym rozdziale, zasadę tę można klasycznie zapisać w postaci

$$\frac{dp}{dt} = F$$

Obliczmy więc pochodną po czasie wartości oczekiwanej **P**. Kolejny raz wystarczy w tym celu policzyć komutator **P** z hamiltonianem:

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{P} \rangle = \frac{i}{2m\hbar}\left\langle \left[\mathbf{P}^2, \mathbf{P}\right]\right\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle [\mathbf{V}, \mathbf{P}]\rangle$$

(9.15)

Pierwszy wyraz jest równy zeru, ponieważ każdy operator komutuje z funkcją, która zależy tylko od niego. Aby obliczyć drugi wyraz, wykorzystamy równanie, którego jeszcze nie udowodniliśmy:

$$\left[\mathbf{V}(x), \mathbf{P}\right] = i\hbar \frac{dV(x)}{dx}$$

(9.16)

Po wstawieniu równania 9.16 do równania 9.15 dostajemy

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{P} \rangle = -\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle$$

Udowodnijmy teraz równanie 9.16. Gdy zapiszemy działanie komutatora na funkcję falową, otrzymujemy

$$\left[\mathbf{V}(x),\mathbf{P}\right]\psi(x)=V(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi(x)-\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)V(x)\psi(x).$$

(9.17)

Powyższe wyrażenie można łatwo uprościć, dostając w efekcie równanie 9.16. Pokazaliśmy więc, że

$$\frac{d}{dt}\langle\mathbf{P}\rangle=-\left\langle\frac{dV}{dx}\right\rangle$$

(9.18)

co stanowi kwantowy odpowiednik równania Newtona opisującego zmianę pędu w czasie.

***

Ćwiczenie 9.3. Pokaż, że prawą stronę równania 9.17 można przekształcić tak, by dała prawą stronę równania 9.16. *Podpowiedź*: rozwiń najpierw drugi wyraz, korzystając ze wzoru na pochodną iloczynu. Następnie poszukaj wyrazów, które można skrócić.

***

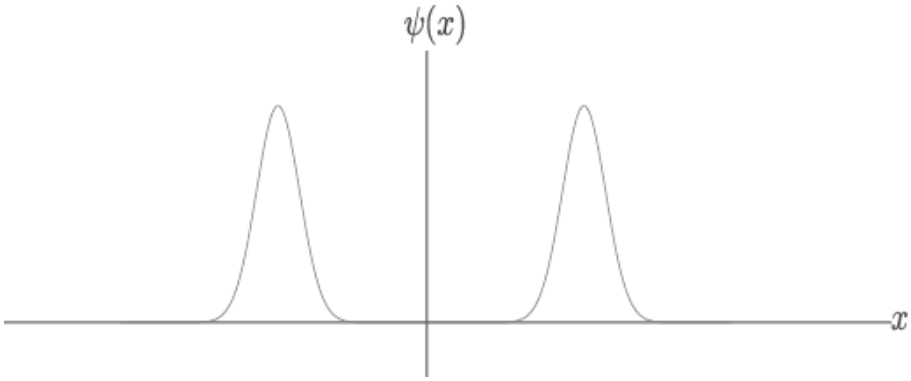
9.7 RUCH PO PROSTEJ I GRANICA KLASYCZNA

Być może myślisz, że udowodniliśmy, iż wartość średnia **X** podąża dokładnie po trajektorii klasycznej. W rzeczywistości udowodniliśmy coś istotnie innego. Różnica polega na tym, że średnia wartość pewnej funkcji zmiennej *x* nie pokrywa się z tą samą funkcją średniej wartości *x*. Gdyby równanie 9.18 miało postać

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{P} \rangle = -\frac{d\langle V \rangle}{d\langle x \rangle}$$

[to równanie jest błędne]
(a chciałbym tu jeszcze raz podkreślić, że tak nie jest), to naprawdę moglibyśmy stwierdzić, że średnie położenia i pędy spełniają równania klasyczne. Tak naprawdę równania klasyczne to tylko przybliżenia, które nieźle się sprawdzają, jeśli możemy zastąpić średnią wartość dV/dx pewną funkcją średniej wartości *x*. Kiedy to ostatnie podstawienie ma sens? Właśnie wtedy, gdy $V(x)$ zmienia się stosunkowo wolno w porównaniu z rozmiarem pakietu falowego. Jeśli *V* zmienia się gwałtownie wewnątrz pakietu falowego, klasyczne przybliżenia z pewnością zawiodą. W takim wypadku zgrabny, wąski pakiet falowy rozpadnie się szybko na mocno rozmytą funkcję falową, która nie będzie w żaden sposób przypominać początkowego kształtu. Funkcja prawdopodobieństwa również ulegnie rozmyciu. Wówczas nie pozostanie nam nic innego jak próby bezpośredniego rozwiązania równania Schrödingera.

Przyjrzyjmy się ostatniemu stwierdzeniu dokładniej. Na razie z matematycznego punktu widzenia nie założyliśmy nic o kształtach naszych pakietów falowych. Niemniej jednak myśleliśmy o nich jako o porządnych funkcjach o eleganckich kształtach i pojedynczym maksimum, gładko zmniejszających się do zera w kierunku dodatnim i ujemnym. Okazuje się, że takie warunki, choć nie wyrażone bezpośrednio w naszych matematycznych założeniach, mają wpływ na to, czy cząstka zachowuje się tak, jak kazałaby nam się tego domyślać mechanika klasyczna.



Ilustracja 9.3 Funkcja bimodalna (o dwóch wierzchołkach), wycentrowana w zerze. Zauważ, że <x> = 0, ale Δx > 0.

Aby zilustrować ten fakt, rozważmy nieco „dziwaczny” pakiet falowy. Ilustracja 9.3 przedstawia bimodalny (czyli mający dwa maksima) pakiet falowy, o środku w zerze osi *x*. Przypuśćmy następnie, że *F*(*x*), gdzie *F* (pochodzi od angielskiego *force*, czyli siła) jest pewną funkcją zmiennej *x*. Wartość oczekiwana *F*(*x*) może różnić się od funkcji *F* przyłożonej do wartości oczekiwanej *x*. Inaczej mówiąc,

$$\langle F(x)\rangle \neq F(\langle x\rangle)$$

Wyrażenie po prawej stronie to funkcja zależna od centrum pakietu falowego. W ogólnym przypadku różni się od lewej strony, co odpowiada naszym wnioskom z poprzedniego podrozdziału – $\langle F(x)\rangle$ ma tę samą postać co wyrażenie po prawej stronie równania 9.18[41].

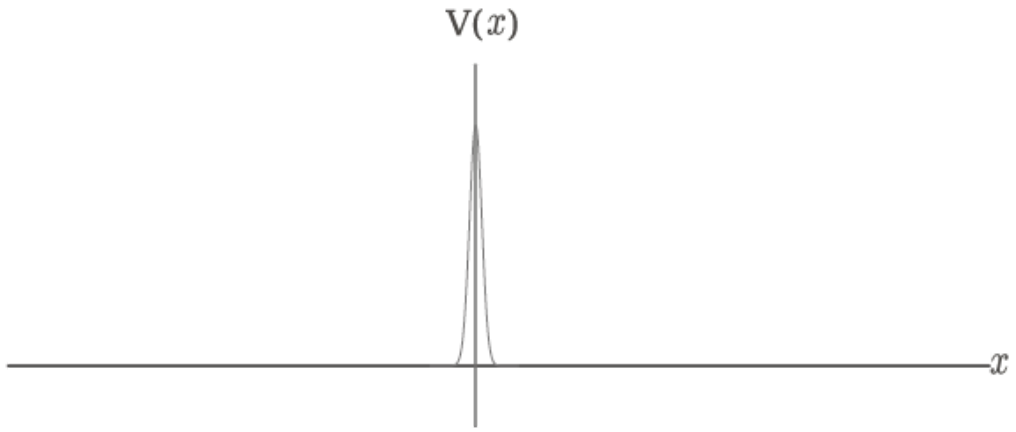
Podam teraz przykład pokazujący, że te dwa wyrażenia mogą się od siebie krańcowo różnić. Przypuśćmy, że funkcja *F* to podnoszenie do kwadratu:

$$F(x) = x^2$$

oraz że pakiet falowy wygląda tak, jak to przedstawiono na ilustracji 9.3. Ile wynosi wartość oczekiwana *x*? Jest ona równa zeru,

podobnie jak i $F(\langle x \rangle)$, ponieważ $F(0) = 0^2 = 0$. Z kolei jaka jest wartość oczekiwana x^2? Z pewnością większa od zera. Tak więc kiedy pakiet falowy nie wygląda jak zgrabny, pojedynczy grzbiet, scharakteryzowany w dużym stopniu przez swój środek, tempo zmiany pędu w czasie nie musi być określone przez siłę obliczoną w wartości oczekiwanej x. Wartość oczekiwana $F(x)$ pokrywa się z $F(\langle x \rangle)$ tylko wtedy, gdy funkcja falowa jest skupiona na pewnym wąskim przedziale. Można zatem powiedzieć, że twierdząc, iż nasze kwantowe równanie ruchu wygląda klasycznie, nieco oszukaliśmy. Tak naprawdę zależy to od kształtu i stopnia lokalizacji pakietu falowego.

Jeśli inne parametry układu pozostają bez zmian, a masa cząstki staje się bardzo duża, pakiet falowy przybiera zwykle postać skupioną w niewielkim obszarze. Gdy tylko funkcja potencjału $V(x)$ zachowuje się stabilnie, czyli nie ma bardzo ostrych wierzchołków, zastąpienie $\langle F(x) \rangle$ wyrażeniem $F(\langle x \rangle)$ daje dobre przybliżenie. Jeśli jednak $V(x)$ ma ostre wierzchołki, pakiet falowy zwykle się rozpada. Przypuśćmy na przykład, że badamy zgrabny pakiet falowy poruszający się w prawo, który w pewnym momencie uderza w punktową strukturę, powiedzmy atom, o funkcji potencjału przypominającej tę z ilustracji 9.4. Pakiet falowy rozpadnie się wtedy na mniejsze i ulegnie dezintegracji. Jeśli natomiast rozważany pakiet natrafi na bardzo gładki potencjał, to przejdzie przez niego, poruszając się mniej więcej zgodnie z klasycznymi równaniami ruchu. Nie oczekujemy, że mechanika kwantowa w każdej możliwej sytuacji da wyniki przypominające te dla mechaniki klasycznej. Spodziewamy się tylko, że da nam ona wyniki podobne do klasycznych w pewnych szczególnych okolicznościach: gdy cząstki są ciężkie, potencjały gładkie i nic nie powoduje rozpadu czy rozproszenia funkcji falowej[42].



Ilustracja 9.4. Funkcja potencjału o ostrym wierzchołku. Funkcje potencjału o ostrych wierzchołkach zwykle powodują, że funkcje falowe ulegają rozproszeniu. Im węższy jest grzbiet potencjału względem rozmiarów pakietu falowego, tym silniej rozproszy się pakiet i tym mniej „klasycznie" będzie się zachowywał.

Jakie sytuacje fizyczne mogą prowadzić do „niedobrych potencjałów", które powodują rozpad funkcji falowej? Przypuśćmy, że jakimś cechom potencjału można przypisać pewien rozmiar. Pomyśl na przykład o ilustracji 9.4 na sterydach, czyli o funkcji mającej wiele wysokich, leżących blisko siebie wierzchołków. Oznaczmy odpowiedni rozmiar przez δx i załóżmy, że δx jest istotnie mniejsza niż nieoznaczoność położenia zbliżającej się cząstki:

$$\delta x < \Delta x$$

Jeśli „zęby" funkcji $V(x)$ mają dużo mniejsze rozmiary od rozmiarów zbliżającego się pakietu falowego, ten ostatni rozpadnie się na wiele małych kawałków. Każdy z nich ulegnie rozproszeniu w innym kierunku. Z grubsza rzecz ujmując, jeśli charakterystyczne elementy kształtu potencjału są mniejsze od długości fali zbliżającej się cząstki, funkcja falowa najczęściej się rozpadnie.

Przypuśćmy, że weźmiesz do ręki kulę do kręgli i zapytasz: „Czemu jest równa Δx?". Pewne wskazówki co do odpowiedzi możemy uzyskać, korzystając z zasady nieoznaczoności. Zwykle $\Delta p \times \Delta x$ jest

większe od $\hbar$. W wielu sensownych przypadkach jednak wielkość ta jest rzędu $\hbar$:

$$\Delta p \Delta x \sim \hbar$$

Powiedzmy, że *p* jest maksymalnie możliwie skupiony w jednym punkcie. Dla zwykłego obiektu makroskopowego jednak zasada nieoznaczoności zazwyczaj sięga ograniczenia dolnego – lewa strona jest mniej więcej *równa* $\hbar$. Stojące za tym powody są bardzo skomplikowane i nie będę ich tu omawiać. Zamiast tego załóżmy po prostu, że tak jest, i zbadajmy konsekwencje tego faktu. Czemu jest równe Δp? To po prostu $m\Delta v$, a więc mamy

$$m \Delta v \Delta x \sim \hbar$$

Przekształcając ostatnie wyrażenie, możemy zatem napisać

$$\Delta v \Delta x \sim \frac{\hbar}{m}$$

albo

$$\Delta x \sim \frac{\hbar}{m \Delta v}$$

Dobrze wiem, że jeśli położę kulę do kręgli na ziemi, to nieoznaczoność jej prędkości będzie bardzo niewielka. Spodziewamy się, że w miarę jak kula staje się coraz cięższa, nieoznaczoność prędkości będzie maleć. Po prawej stronie powyższej zależności w mianowniku występuje *m*, a więc niezależnie od wartości Δv wraz ze zmniejszaniem się *m* wielkość Δx będzie rosnąć. W szczególności stanie się większa niż wybrzuszenia potencjału.

W granicy kwantowomechanicznej, gdy *m* staje się bardzo małe, a Δx zwykle rośnie, na ewolucję funkcji falowej wpływa zygzakowaty potencjał, który względem funkcji falowej przybiera coraz ostrzejszy

i mocniej poszarpany kształt. Wtedy właśnie dochodzi do rozpadu funkcji falowej. Gdy zaś *m* mocno rośnie, *Δx* maleje. W wypadku dużej kuli do kręgli mamy do czynienia z bardzo mocno skoncentrowanym pakietem falowym. Kiedy przemieszcza się on przez zygzakowaty potencjał, *drobniutka* funkcja falowa wciąż postrzega potencjał jako względnie łagodny. Poruszanie się w gładkim potencjale nie powoduje rozpadu funkcji falowej na części. Duże masy i gładkie potencjały charakteryzują granicę klasyczną. Cząstka o małej masie, przemieszczająca się przez ostro zmieniający się potencjał, zachowuje się jak układ kwantowy.

A co można powiedzieć o elektronach? Czy są one wystarczająco masywne, by zachowywać się w sposób klasyczny? Odpowiedź zależy od relacji między potencjałem a masą. Jeśli na przykład rozważamy dwie płytki kondensatora oddalone od siebie o centymetr, między którymi występuje gładkie pole elektryczne, to elektron przeleci między nimi jak porządna, koherentna, niemal klasyczna cząstka. Natomiast w potencjale związanym z jądrem atomu zawsze występuje ostry wierzchołek. Jeśli fala elektronu natrafi na taki potencjał, rozproszy się po całej okolicy.

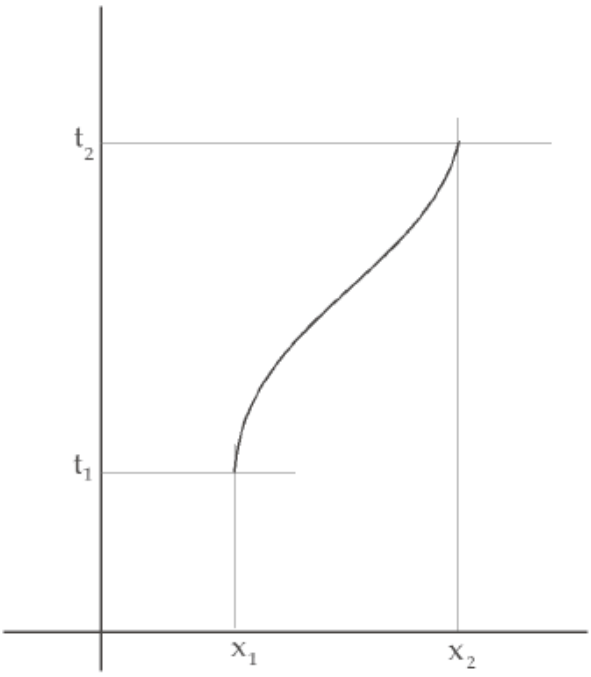
Zanim ostatecznie pożegnamy ten temat, chciałbym wspomnieć o pakietach falowych o *minimalnej nieoznaczoności*. Odpowiadają one sytuacji, w której $\Delta x \Delta p$ jest równe $\hbar/2$ (a nie większe od $\hbar/2$). Inaczej mówiąc, wielkość $\Delta x \Delta p$ jest wówczas tak mała, jak tylko pozwala na to mechanika kwantowa. Kształt takich pakietów opisuje krzywa Gaussa, i często nazywa się je *gaussowskimi* pakietami falowymi. W miarę upływu czasu wypłaszczają się one i rozmywają. Podobnych pakietów falowych nie spotyka się bardzo często, ale naprawdę istnieją. Spoczywająca kula do kręgli stanowi ich niezłe przybliżenie. W wykładzie 10 przekonamy się, że stan podstawowy oscylatora harmonicznego to gaussowski pakiet falowy.

9.8 CAŁKI PO TRAJEKTORIACH

Klasyczna mechanika hamiltonowska koncentruje się na kolejnych stopniowych zmianach stanu układu. Istnieje jednak inne sformułowanie mechaniki – zasada najmniejszego działania – w którym rozważa się jednocześnie całe historie. Dla pojedynczej cząstki oznacza to przyglądanie się jej pełnej trajektorii, od jakiegoś czasu początkowego do jakiegoś czasu końcowego. Fizyczna zawartość obydwu podejść jest taka sama, ale inaczej rozkładają się w nich akcenty. Mechanika hamiltonowska wybiera jakiś moment i mówi nam, jak zmienia się stan układu między tym momentem a następnym. Zasada najmniejszego działania cofa się o krok i przygląda globalnej sytuacji. Pozwala nam wyobrazić sobie przyrodę sprawdzającą wszystkie możliwe trajektorie i wybierającą tę, dla której działanie między ustalonymi punktami początkowym i końcowym jest najmniejsze[43].

Mechanika kwantowa również obejmuje opis hamiltonowski, który koncentruje się na stopniowych zmianach. Nazywa się je zależnym od czasu równaniem Schrödingera i ma bardzo ogólny charakter. O ile umiemy to stwierdzić, można je wykorzystać do opisu wszystkich układów fizycznych. I tak jednak ma sens zapytanie, tak jak zrobił to prawie siedemdziesiąt lat temu Richard Feynman, czy istnieje sposób patrzenia na mechanikę kwantową analizujący jednocześnie całe historie. Inaczej mówiąc, czy istnieje sformułowanie mechaniki kwantowej odpowiadające klasycznej zasadzie najmniejszego działania? Nie wyjaśnię w tym wykładzie szczegółów Feynmanowskiego opisu opartego na całkach po trajektoriach, ale dla pobudzenia twojego apetytu podam pewne wskazówki pozwalające zrozumieć, na czym on polega.

Najpierw chciałbym pokrótce przypomnieć ci klasyczną zasadę najmniejszego działania, którą przedstawiłem w pierwszym tomie. Przypuśćmy, że pewna klasyczna cząstka wyrusza w chwili t_1 z położenia x_1 i dociera w chwili t_2 do położenia x_2 (tak jak pokazuje to ilustracja 9.5). Pytanie brzmi: po jakiej trajektorii poruszała się cząstka w czasie między t_1 a t_2?



Ilustracja 9.5. Trajektoria klasyczna. Rysunek przedstawia ścieżkę, po której cząstka może przesunąć się z punktu 1 (x_1, t_1) do punktu 2 (x_2, t_2). Aby nie komplikować zbytnio sytuacji, pominęliśmy oś $\dot{x}$, odpowiadającą prędkości cząstki wzdłuż osi x.

Według zasady najmniejszego działania rzeczywista trajektoria to ta, dla której działanie jest najmniejsze. *Działanie* oczywiście ma tu precyzyjne, techniczne znaczenie – jest to całka z lagranżjanu po trajektorii łączącej punkt początkowy z końcowym. Dla prostych układów lagranżjan to energia kinetyczna minus energia potencjalna. Tak więc dla cząstki poruszającej się w jednym wymiarze działanie to

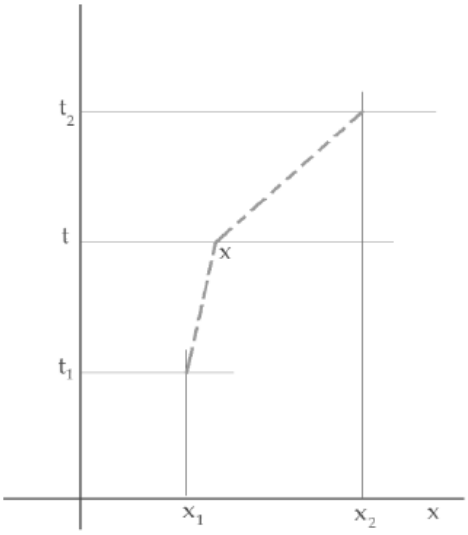
$$A = \int_{t_1}^{t_2} L\left(x, \dot{x} \right) dt$$

(9.19)

albo, zapisane inaczej,

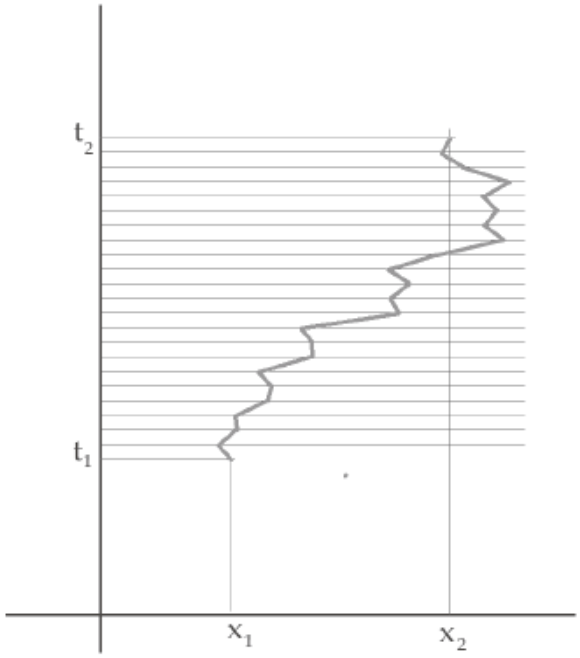
$$A = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \right) dt$$

Idea polega na wypróbowaniu wszystkich możliwych trajektorii łączących ustalone punkty brzegowe i obliczeniu *A* dla każdej z nich[44]. Wygrywa ta, dla której działanie jest najmniejsze[45].



Ilustracja 9.6. Pierwszy krok do kwantyzacji trajektorii. Podzielmy trajektorię cząstki na dwie równe części (równe, jeśli chodzi o czas). Cząstka nadal ma ten sam punkt początkowy i końcowy, ale teraz przechodzi też przez pośredni punkt x.

Zajmijmy się teraz mechaniką kwantową. Idea dobrze określonej trajektorii łączącej dwa punkty w mechanice kwantowej nie ma sensu z uwagi na zasadę nieoznaczoności. Możemy jednak nadal postawić następujące pytanie: jeśli wiemy, że pewna cząstka startuje z punktu (x_1, t_1), jakie jest prawdopodobieństwo, że znajdziemy ją w punkcie (x_2, t_2), gdy zmierzymy jej położenie?



Ilustracja 9.7. Kolejne etapy konstrukcji całki po trajektoriach. Pozostawiając bez zmian punkt początkowy i końcowy, dzielimy trajektorię na wiele przedziałów o identycznej długości.

Jak zawsze w mechanice kwantowej prawdopodobieństwo to kwadrat modułu zespolonej amplitudy. Globalna wersja mechaniki kwantowej pyta więc:

jeśli wiemy, że pewna cząstka startuje z punktu (x_1, t_1), to jak wygląda amplituda odpowiadająca znalezieniu jej w punkcie (x_2, t_2)?

Oznaczmy tę amplitudę $C(x_1, t_1; x_2, t_2)$ albo po prostu $C_{1,2}$. Początkowy stan cząstki to $|\Psi(t_1)\rangle = |x_1\rangle$. W czasie między t_1 a t_2 stan ewoluuje do[46]

$$|\Psi(t_2)\rangle = e^{-iH(t_2-t_1)}|x_1\rangle$$

(9.20)

Amplituda odpowiadająca znalezieniu cząstki w $|x_2\rangle$ to po prostu iloczyn skalarny $|\Psi(t_2)\rangle$ z $|x_2\rangle$. Jego wartość liczbowa wynosi

$$C_{1,2} = \langle x_2 | e^{-iH(t_2-t_1)} | x_1 \rangle$$

(9.21)

Inaczej mówiąc, amplitudę odpowiadającą przejściu z x_1 do x_2 w przedziale czasowym $t_2 - t_1$ konstruuje się, wstawiając wyrażenie $e^{-iH(t_2-t_1)}$ między położeniem początkowym a końcowym. Aby wzór wyglądał prościej, oznaczymy $t_2 - t_1$ przez t. Wówczas amplituda przybiera postać

$$C_{1,2} = \langle x_2 | e^{-iHt} | x_1 \rangle$$

(9.22)

Podzielmy teraz przedział czasowy t na dwa mniejsze przedziały o długości $t/2$, tak jak pokazano to na ilustracji 9.6. Operator e^{-iHt} można przedstawić jako iloczyn dwóch operatorów:

$$e^{-iHt} = e^{-iHt/2} e^{-iHt/2}$$

(9.23)

Wstawiwszy między czynniki w iloczynie operator jednostkowy wyrażony jako

$$I = \int dx |x\rangle\langle x|$$

(9.24)

otrzymujemy amplitudę w postaci

$$C_{1,2} = \int dx \langle x_2 | e^{-iHt/2} | x \rangle \langle x | e^{-iHt/2} | x_1 \rangle$$

(9.25)

Ostatnie równanie wygląda dość skomplikowanie, ale ma bardzo ciekawą interpretację, którą teraz naszkicuję. Amplituda odpowiadająca przejściu z x_1 do x_2 w przedziale czasowym t to całka po wszystkich pośrednich położeniach x. Funkcję pod całką stanowi amplituda odpowiadająca przejściu z x_1 do x w przedziale czasowym $t/2$ *pomnożona* przez amplitudę odpowiadającą przejściu z x do x_2 w kolejnym przedziale czasowym $t/2$.

Ilustracja 9.6 przedstawia tę samą ideę graficznie. W fizyce klasycznej cząstka, by przemieścić się z x_1 do x_2, musi przejść przez jakiś pośredni punkt x. W mechanice kwantowej amplituda odpowiadająca przejściu z x_1 do x_2 to całka po wszystkich możliwych punktach pośrednich.

Podobną operację możemy zastosować wielokrotnie, dzieląc przedział czasowy na dużą liczbę malutkich przedziałów, tak jak pokazano to na ilustracji 9.7. Nie będę tu wypisywał skomplikowanych wzorów, ale ogólna idea powinna być jasna. Dla każdego małego przedziału czasowego, powiedzmy o długości ε, uwzględniamy we wzorze czynnik

$$e^{-i\varepsilon H}$$

Następnie między każde dwa takie czynniki wstawiamy identyczność, tak że amplituda $C_{1,2}$ staje się całką wielokrotną po wszystkich pośrednich położeniach. Funkcja podcałkowa powstaje z iloczynów wyrażeń postaci

$$\langle x_i | e^{-i\varepsilon H} | x_{i+1} \rangle$$

Jeśli zdefiniujemy $U(\varepsilon)$ jako

$$U(\varepsilon) = e^{-i\varepsilon H}$$

to cały iloczyn możemy zapisać jako

$$\langle x_2 | U^N | x_1 \rangle$$

albo jako

$$\langle x_2 | UUUU \ldots | x_1 \rangle$$

W tym równaniu czynnik *U* występuje *N* razy, gdzie *N* to liczba kroków epsilonowych. Teraz możemy pomiędzy kolejne *U* wstawić operatory identycznościowe.

Takie wyrażenie możemy nazwać amplitudą dla danej trajektorii. Cząstka jednak nie porusza się po jednej ściśle określonej ścieżce. Kiedy przechodzimy do granicy względem liczby infinitezymalnych przedziałów czasowych, okazuje się, że *amplituda to całka po wszystkich możliwych trajektoriach łączących punkt początkowy z końcowym.* Feynman odkrył elegancki fakt: amplituda dla każdej ścieżki wyraża się prostym wzorem związanym z pewnym pojęciem z mechaniki klasycznej – z odpowiadającym tej ścieżce działaniem. Dokładna postać wzoru to

$$e^{iA/\hbar}$$

gdzie *A* to działanie dla pojedynczej trajektorii.

Podejście Feynmana można podsumować pojedynczym równaniem:

$$C_{1,2} = \int_{\text{ścieżki}} e^{iA/\hbar}$$

(9.26)

Sformułowanie oparte na całkach po trajektoriach to nie tylko elegancka sztuczka matematyczna: odgrywa ono bardzo istotną rolę. Tak naprawdę można je wykorzystać do wyprowadzenia zarówno obydwu równań Schrödingera, jak i wszystkich relacji komutacyjnych w mechanice kwantowej. Prawdziwą siłę pokazuje jednak dopiero w kontekście kwantowej teorii pola, w której okazuje się kluczowym narzędziem pozwalającym sformułować prawa fizyki cząstek elementarnych.

37 Stwierdzenie to dotyczy zarówno rzeczywistej, jak i urojonej części $\psi(x)$.

38 Nasze poruszające się wyłącznie w prawo cząstki przypominają mi o klasycznym opowiadaniu *The Zax* Doktora Seussa (tytułowe zaksy to istoty uparcie podążające w raz obranym kierunku – przyp. tłum.), i mam ochotę nazwać je „podróżującymi w prawo zaksonami". Trudno powiedzieć, jak potoczyłaby się ta historia, gdyby Theodor Geisel wiedział więcej o neutrinach.

39 Proszę, odważyłem się to napisać!

40 Z technicznego punktu widzenia to samo dotyczy cząstek swobodnych. Wówczas jednak przyjmujemy, że funkcja $V(x)$ jest stale równa zeru.

41 Przypomnijmy, że w tamtym równaniu wyrażenie $-\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle$ przedstawia siłę.

42 Nie brzmi to tak dobrze jak slogan jakiejś kampanii reklamowej, ale i tak pozostaje prawdziwe.

43 Ściśle rzecz ujmując, zasadę tę należałoby nazwać „zasadą stacjonarnego działania". Rzeczywiste trajektorie to punkty stacjonarne działania, a nie zawsze minima. Z naszego punktu widzenia powyższe rozróżnienie nie jest zbyt istotne.

44 Tak przynajmniej wygląda to na poziomie abstrakcyjnej koncepcji. W praktyce zadanie upraszczają nam równania Eulera–Lagrange'a, co omawialiśmy w tomie pierwszym.

45 Aby nasze diagramy nie wyglądały zbyt skomplikowanie, nie umieszczamy na nich osi $\dot{x}$, chociaż lagranżjan rzecz jasna zależy od $\dot{x}$.

46 W tym rozumowaniu używamy jednostek, dla których $\hbar = 1$ (przyp. tłum.).

WYKŁAD 10

Oscylator harmoniczny

– Wydaje mi się, że zaczynam rozumieć, Lenny – oznajmia Art. – Cały obraz staje się coraz jaśniejszy. Minus Jeden, Ogólna Nieoznaczoność, pary splątane, hamiltonian, nawet degeneracja. A co spotkamy teraz?
– Oscylacje, Art – odpowiada Lenny. – Wibracje. Grasz przecież na skrzypcach, możemy więc cię poprosić o ostatni kawałek tego wieczoru. Zagraj coś nieźle rozedrganego.

Wśród wszystkich składników występujących w konstrukcji kwantowego opisu świata dwa odgrywają fundamentalną rolę. Jeden z nich to rzecz jasna spin, zwany też kubitem. W logice klasycznej wszystkie struktury są zbudowane z podstawowych pytań typu tak–nie. Podobnie w mechanice kwantowej każde logiczne pytanie można sprowadzić do pewnego pytania dotyczącego kubitów. We wcześniejszych wykładach poświęciliśmy kubitom wiele miejsca. Teraz przyszła pora na nauczenie się czegoś o drugim podstawowym składniku mechaniki kwantowej – oscylatorze harmonicznym.

Oscylator harmoniczny to nie pewien konkretny obiekt, taki jak atom wodoru czy kwark. Tak naprawdę stanowi on matematyczną koncepcję pozwalającą nam zrozumieć wiele rozmaitych zjawisk. Odpowiednie pojęcie istnieje też w fizyce klasycznej, ale dopiero w teorii kwantowej zaczyna ono odgrywać pierwszoplanową rolę.

Jednym z przykładów oscylatora harmonicznego jest cząstka poruszająca się po prostej pod wpływem liniowej siły przywracającej, taka jak choćby słynny w fizyce ciężarek przymocowany do końca

sprężyny. Idealna sprężyna spełnia prawo Hooke'a: siła działająca na odchyloną od położenia równowagi masę jest proporcjonalna do długości tego odchylenia. Nazywamy ją *siłą przywracającą*, gdyż przyciąga ona masę z powrotem ku położeniu równowagi.

Kolejny przykład to kulka tocząca się tam i z powrotem po dnie miski, przy założeniu, że nie dotyczą jej straty energii związane z tarciem. Podobne układy charakteryzuje funkcja energii potencjalnej wyglądająca jak parabola:

$$V(x) = \frac{k}{2}x^2$$

(10.1)

Stałą *k* nazywa się współczynnikiem sprężystości. Jeśli przypomnimy sobie, że siła działająca na badany obiekt to minus gradient funkcji *V*, okaże się, że w tym wypadku wzór na siłę ma postać

$$F = -kx.$$

(10.2)

Znak minus mówi nam, że siła działa w kierunku przeciwnym do przesunięcia czy odchylenia masy i przyciąga ją z powrotem do początku układu współrzędnych.

Dlaczego oscylatory harmoniczne tak często spotyka się w fizyce? Wynika to z faktu, że prawie każda funkcja gładka wygląda jak parabola w okolicy swojego minimum. W rzeczywistości wiele rodzajów układów charakteryzuje funkcja energii, którą można przybliżyć przez funkcję kwadratową pewnej zmiennej odpowiadającej odchyleniu od równowagi. Kiedy zaburzy się podobny układ, zacznie on oscylować wokół punktu równowagi. Oto kilka innych przykładów:

- Atom w siatce krystalicznej. Jeśli atom przesunie się nieco ze swojego położenia równowagi, zadziała nań w przybliżeniu liniowa siła przywracająca. Ruch odbywa się w trzech wymiarach i składa się tak naprawdę z trzech niezależnych od siebie oscylacji.
- Prąd elektryczny w obwodzie o niewielkim oporze często oscyluje z pewną charakterystyczną częstotliwością. Matematyka opisująca takie obwody pokrywa się z matematyką dotyczącą ciężarków przymocowanych do sprężyn.
- Fale. Jeśli zaburzy się powierzchnię stawu, powstaną na niej fale. Obserwator znajdujący się w pewnym ustalonym położeniu zobaczy w momencie przejścia fali oscylację powierzchni wody. Odpowiedni ruch można opisać jako prosty ruch harmoniczny. To samo dotyczy fal dźwiękowych.
- Fale elektromagnetyczne. Tak samo jak wszystkie inne fale, fala świetlna czy radiowa oscyluje, kiedy cię mija. Jak się okazuje, matematyczny opis oscylujących cząstek ma też zastosowanie do fal elektromagnetycznych.

Powyższą listę można by ciągnąć jeszcze długo, ale matematyka za każdym razem wygląda tak samo. Aby móc myśleć o jakimś konkretnym układzie, będziemy sobie wyobrażać oscylator jako wiszący na sprężynie ciężarek. Nie potrzebuję pewnie wyjaśniać, że do opisu zwykłego ciężarka i sprężyny nie musimy stosować mechaniki kwantowej. W związku z tym będziemy raczej rozważać kwantyzację miniaturowej wersji takiego układu.

10.1 OPIS KLASYCZNY

Wysokość zwisającego ciężarka oznaczymy przez y. Początek układu współrzędnych wybierzemy tak, by pozycja równowagi ciężarka, czyli położenie, w którym pozostaje on w spoczynku, odpowiadała $y = 0$. Aby zbadać ten układ z klasycznego punktu widzenia, możemy zastosować opartą na lagranżjanie metodę, którą poznaliśmy

w pierwszym tomie. Energia kinetyczna i potencjalna są odpowiednio równe $\frac{1}{2}m\dot{y}^2$ i $\frac{1}{2}ky^2$.

Jak pewnie pamiętasz, lagranżjan to energia kinetyczna minus energia potencjalna:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{y}^2 - \frac{1}{2}ky^2$$

W pierwszym kroku zapiszemy lagranżjan w pewnej standardowej postaci, zastępując *y* inną zmienną, którą nazwiemy *x*. Nowa współrzędna, podobnie jak poprzednia, będzie przedstawiać przesunięcie masy. Zamieniając *y* na *x*, tak naprawdę wybieramy tylko wygodne jednostki. Określmy nową zmienną wzorem

$$x = \sqrt{m}y$$

Zapisany jako funkcja *x* lagranżjan wygląda następująco:

$$L = \frac{1}{2}\dot{x}^2 - \frac{1}{2}\omega^2 x^2$$

(10.3)

Stała ω, określona wzorem $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, okazuje się równa częstotliwości oscylatora.

Takie podstawienie pozwala nam opisać każdy oscylator w identycznej postaci. Jedyna różnica między otrzymanymi lagranżjanami będzie leżała w częstotliwości ω.

Skorzystajmy teraz z równań Lagrange'a, by wyprowadzić równania ruchu. Ponieważ badany układ jest jednowymiarowy, mamy tylko jedno równanie Lagrange'a:

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$$

(10.4)

Kiedy wykonamy odpowiednie operacje na równaniu 10.3, otrzymamy

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \dot{x}$$

(10.5)

Widoczną powyżej zmienną nazywa się kanonicznym pędem sprzężonym do *x*. Zróżniczkowanie jej po czasie daje

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \ddot{x}$$

(10.6)

i znamy już jawną postać prawej strony równania 10.4. Zajmijmy się teraz lewą stroną:

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -\omega^2 x$$

(10.7)

Przyrównanie do siebie obu stron równania Lagrange'a (czyli równań 10.7 i 10.6) daje

$$-\omega^2 x = \ddot{x}$$

(10.8)

Ostatnie równanie jest oczywiście równoważne drugiej zasadzie dynamiki, *F = ma*. Skąd wziął się we wzorze minus? Pochodzi on od tego, że *F* to funkcja przywracająca – skierowana przeciwnie do odchylenia od położenia równowagi. Widziałeś już podobne równania wystarczająco wiele razy, by wiedzieć, że rozwiązanie będzie się składać z sinusów i cosinusów. Ogólna postać rozwiązania to

$$x = A\cos(\omega t) + B\sin(\omega t)$$

(10.9)

co pokazuje nam, że ω to faktycznie częstotliwość oscylatora. Kiedy zróżniczkujemy tę funkcję dwukrotnie, pojawi się przed nią czynnik ω^2.

***

Ćwiczenie 10.1. Znajdź drugą pochodną po czasie *x* z równania 10.9, tym samym pokazując, że jest ona rozwiązaniem równania 10.8.

***

10.2 OPIS KWANTOWOMECHANICZNY

Wróćmy teraz do naszej mikroskopowej wersji układu z ciężarkiem i sprężyną. Przyjmijmy, że jest ona nie większa niż pojedyncza cząsteczka. Na pierwszy rzut oka może się to wydawać dziwaczne – jak mielibyśmy zbudować tak miniaturową sprężynę? Tak naprawdę przyroda dostarcza nam przeróżnych mikroskopowych

odpowiedników sprężyn. Wiele cząsteczek składa się z dwóch atomów, powiedzmy z jednego ciężkiego i jednego dużo lżejszego. Działające wewnątrz siły utrzymują cząsteczkę w stanie równowagi, w którym odległość między atomami przyjmuje pewną ustaloną wartość. Kiedy lżejszy atom zostanie nieco przesunięty, siły te będą przyciągać go z powrotem do położenia równowagi. Taka cząsteczka to miniaturowa wersja układu z ciężarkiem i sprężyną, tak mała, że do jej zrozumienia musimy użyć mechaniki kwantowej.

Kiedy znaleźliśmy już klasyczny lagranżjan, możemy zabrać się do konstrukcji kwantowego opisu naszego układu. Przede wszystkim potrzebujemy przestrzeni stanów. Jak się już przekonaliśmy, stan cząstki poruszającej się po prostej reprezentuje funkcja falowa $\psi(x)$. Każdy z wielu możliwych stanów odpowiada innej funkcji falowej. Funkcję $\psi(x)$ definiuje się tak, by wyrażenie $\psi^*(x)\psi(x)$ było gęstością prawdopodobieństwa (prawdopodobieństwem odpowiadającym przedziałowi o długości 1) znalezienia cząstki w położeniu x:

$$\psi^*(x)\psi(x) = P(x)$$

W powyższym równaniu $P(x)$ oznacza gęstość prawdopodobieństwa. Dysponujemy już więc pewnego rodzaju kinematyką – specyfikacją tego, czym są stany układu.

Czy $\psi(x)$ może być zupełnie dowolną funkcją? Oprócz wymagania, by była ona ciągła i różniczkowalna, jedyny dodatkowy warunek, jaki na nią nakładamy, mówi, że całkowite prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w jakimś dowolnym położeniu musi być równe 1:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1$$

(10.10)

Może się wydawać, że takie ograniczenie nie powinno odgrywać dużej roli. Niezależnie od tego, jaka liczba pojawia się po prawej

stronie powyższej równości, zawsze możemy pomnożyć ψ przez pewną stałą, tak by całka stała się równa 1. Zawsze, o ile tylko początkowa liczba nie jest równa zeru lub plus nieskończoności. Ponieważ wyrażenie $\psi^*(x)\psi(x)$ jest nieujemne, nie musimy się specjalnie martwić o zero, nieskończoność jednak stanowi potencjalnie istotny problem: dla wielu funkcji całka w równaniu 10.10 faktycznie okazuje się nieskończenie duża. Warunki narzucane na sensowną funkcję falową zawierają więc wymóg, by ψ zbiegała do zera tak szybko, żeby wystarczało to do zbieżności całki. Funkcje spełniające ten warunek nazywa się czasem *normalizowalnymi*.

Naturalnie pojawiają się dwa pytania dotyczące oscylatora harmonicznego:

- Jak zmienia się wektor stanu jako funkcja zależna od czasu? Aby odpowiedzieć na to pytanie, musimy poznać odpowiedni hamiltonian.
- Jakie są możliwe energie oscylatora? Odpowiedź na to pytanie również kryje się w hamiltonianie.

Tak więc by dowiedzieć się czegokolwiek przydatnego, potrzebujemy hamiltonianu. Na szczęście nietrudno wyprowadzić jego postać, opierając się na znajomości lagranżjanu, i za chwilę podpowiem ci, jak to zrobić. Najpierw przypomnijmy jednak, że kanoniczny pęd sprzężony do x definiuje się wzorem $\partial L / \partial \dot{x}$[47]. Łącząc ten fakt z równaniem 10.5, dostajemy

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \dot{x}$$

Naśladując prostą definicję pochodzącą z mechaniki klasycznej, przekonujemy się, że hamiltonian dla oscylatora harmonicznego ma postać:

$$H = p\dot{x} - L$$

gdzie *p* to kanoniczny pęd sprzężony do *x*, a *L* oznacza lagranżjan[48]. Moglibyśmy pracować dalej, stosując właśnie tę definicję, ale uprościmy sobie nieco życie, przypominając, że lagranżjan to energia kinetyczna *minus* energia potencjalna. Wobec tego hamiltonian to energia kinetyczna *plus* energia potencjalna, czyli, inaczej mówiąc, całkowita energia układu. W wypadku oscylatora harmonicznego możemy więc zapisać hamiltonian jako

$$H = \frac{1}{2}\dot{x}^2 + \frac{1}{2}\omega^2 x^2$$

Na razie idzie nam nieźle, ale jeszcze nie skończyliśmy rozumowania. Wyraziliśmy już energię kinetyczną w zależności od prędkości; w mechanice kwantowej jednak musimy przedstawiać nasze obserwable jako *operatory*, a nie dysponujemy „operatorem prędkości". Aby rozwiązać ten problem, będziemy zmuszeni przekształcić nasze sformułowanie, tak by wszystko zależało od położenia i od pędu kanonicznego, które mają standardowe przedstawienie jako operatory. Zapisanie hamiltonianu jako funkcji zależnej od pędu sprzężonego jest dość proste, gdyż

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \dot{x}$$

co pozwala nam wyrazić hamiltonian w postaci

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}\omega^2 x^2$$

(10.11)

Tak właśnie wygląda klasyczny hamiltonian. Teraz możemy uzyskać jego kwantowomechaniczny odpowiednik, interpretując *x* i *p* jako operatory, określone przez swoje działanie na $\psi(x)$. Tak jak robiliśmy to wcześniej, na oznaczenie naszych operatorów kwantowych

będziemy używać pogrubionych symboli **X** i **P**, chcąc odróżnić je w ten sposób od klasycznych odpowiedników, *x* i *p*. W poprzednich wykładach dowiedzieliśmy się, jak dokładnie działają operatory **X** i **P**. **X** po prostu mnoży funkcję falową przez zmienną położenia:

$$\mathbf{X}\left|\psi(x)\right\rangle \Rightarrow x\psi(x)$$

P zaś przybiera postać znaną nam z innych jednowymiarowych problemów:

$$\mathbf{P}\left|\psi(x)\right\rangle \Rightarrow -i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x)$$

Teraz możemy wyznaczyć już działanie hamiltonianu na funkcję falową, po prostu działając na nią dwukrotnie operatorem **P**. Odpowiada to dokładnie procedurze, którą przedstawiliśmy w wykładzie 9. Inaczej mówiąc,

$$\mathbf{H}\left|\psi(x)\right\rangle \Rightarrow \frac{1}{2}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(-i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}))+\frac{1}{2}\omega^2x^2\psi(x)$$

czyli

$$\mathbf{H}\left|\psi(x)\right\rangle \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\omega^2x^2\psi(x)$$

(10.12)

W zapisie użyliśmy pochodnych cząstkowych, ponieważ w ogólnym przypadku *ψ* zależy też od innej zmiennej, od *czasu*. Czas nie jest operatorem i odgrywa tu inną rolę niż położenie *x*, ale wektor stanu faktycznie zmienia się w czasie, a więc powinniśmy traktować *t* jako parametr. Pochodne cząstkowe wskazują nam, że opisujemy układ w „pewnym ustalonym momencie”.

10.3 RÓWNANIE SCHRÖDINGERA

Równanie 10.12 mówi nam, jak hamiltonian działa na ψ. Pora zastosować je w praktyce. Jak stwierdziliśmy w poprzednim rozdziale, jednym z naszych zadań jest ustalenie, jak wektor stanu zmienia się w czasie. Zapiszmy więc nasze zależne od czasu równanie Schrödingera:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{\hbar}\mathbf{H}\psi$$

Podstawiwszy za **H** wyrażenie z równania 10.12, dostajemy

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar}{2}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\frac{1}{2\hbar}\omega^2x^2\psi(x)$$

(10.13)

Ostatnie równanie pokazuje, że jeśli znamy ψ (a raczej zarówno jej część rzeczywistą, jak i urojoną) w pewnym szczególnym momencie, to możemy przewidzieć, jak będzie ona wyglądać w dowolnym przyszłym czasie. Zauważ, że równanie ma charakter zespolony – występuje w nim czynnik *i*. Oznacza to, że jeśli nawet w początkowej chwili $t = 0$ funkcja ψ przyjmuje tylko rzeczywiste wartości, to wkrótce potem jej część urojona stanie się niezerowa. Dowolne rozwiązanie ψ musi więc być zespoloną funkcją zmiennych x i t.

Nasze równanie można rozwiązać na wiele sposobów. Jednym z nich jest na przykład użycie komputera i znalezienie rozwiązania numerycznie. W tym celu zaczynamy od pewnej znanej wartości $\psi(x)$ i obliczamy odpowiednie pochodne. Kiedy już je znamy, wyznaczamy na ich podstawie, jak $\psi(x)$ zmienia się w jakimś małym przedziale czasu. Następnie dodajemy znaleziony przyrost do początkowej wartości $\psi(x)$ i powtarzamy procedurę od początku. Po wielokrotnym wykonaniu tych kroków przekonamy się, że $\psi(x)$

zachowuje się w ciekawy sposób – w pewnym sensie zacznie się poruszać. Tak naprawdę przy danych założeniach badana funkcja utworzy pakiet falowy, który będzie się przemieszczać w sposób przypominający oscylator harmoniczny.

10.4 POZIOMY ENERGETYCZNE

Kolejne zadanie, do którego możesz wykorzystać hamiltonian, to wyznaczenie poziomów energetycznych oscylatora harmonicznego dzięki znalezieniu wektorów własnych i wartości własnych energii. Jak dowiedzieliśmy się w wykładzie 4, kiedy już poznamy te wartości i wektory własne, będziemy mogli określić zależność funkcji falowej od czasu bez rozwiązywania żadnych równań różniczkowych. Wynika to z tego, że znamy już zależność od czasu dla każdego wektora własnego energii. Przed przeczytaniem następnego fragmentu może ci się przydać powtórne przejrzenie przepisu na ket(a) Schrödingera podanego w rozdziale 4.13.

Na razie skoncentrujemy się na znalezieniu samych wektorów własnych energii, wykorzystując do tego równanie Schrödingera niezależne od czasu:

$$\mathbf{H}|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle$$

Indeks *E* ma nam przypominać, że *ψE* to wektor własny odpowiadający pewnej konkretnej wartości własnej *E*. Powyższe równanie definiuje jednocześnie dwa obiekty: funkcję falową *ψE*(*x*) oraz poziomy energetyczne *E*. Możemy uczynić je dużo mniej abstrakcyjnym, rozpisując **H** przy użyciu równania 10.12:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2\psi_E(x)}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\omega^2x^2\psi_E(x)=E\psi_E(x)$$

(10.14)

Aby rozwiązać otrzymane równanie, musimy

- Znaleźć dopuszczalne wartości *E*, pozwalające na istnienie rozwiązania matematycznego
- Znaleźć wartości własne i ewentualne wektory własne energii.

Okazuje się to nieco bardziej skomplikowane, niż mogłoby się wydawać. Równanie ma rozwiązanie dla każdej wartości *E*, w tym dla wszystkich liczb zespolonych, ale większość tych rozwiązań z fizycznego punktu widzenia jest pozbawiona sensu. Jeśli po prostu zaczniemy od pewnego punktu i będziemy rozwiązywać równanie Schrödingera metodą małych przyrostów, prawie zawsze przekonamy się, że $\psi(x)$ rośnie (czy „wybucha"), gdy *x* staje się bardzo duże. Inaczej mówiąc, może się okazać, że potrafimy znaleźć rozwiązania równania, ale bardzo rzadko będą one normalizowalne.

Tak naprawdę dla większości wartości *E*, w tym dla wszystkich liczb o niezerowej części urojonej, rozwiązania równania 10.14 rosną wykładniczo, gdy *x* zbliża się do plus nieskończoności, do minus nieskończoności albo w obu wypadkach. Tego typu rozwiązania nie mają sensu fizycznego: mówiłyby nam, że współrzędna naszego oscylatora z olbrzymim prawdopodobieństwem znajduje się nieskończenie daleko. Oczywiście chcemy narzucić naszym rozważaniom jakiś warunek, który wyeliminuje takie rozwiązania. Wybieramy następujące wymaganie:

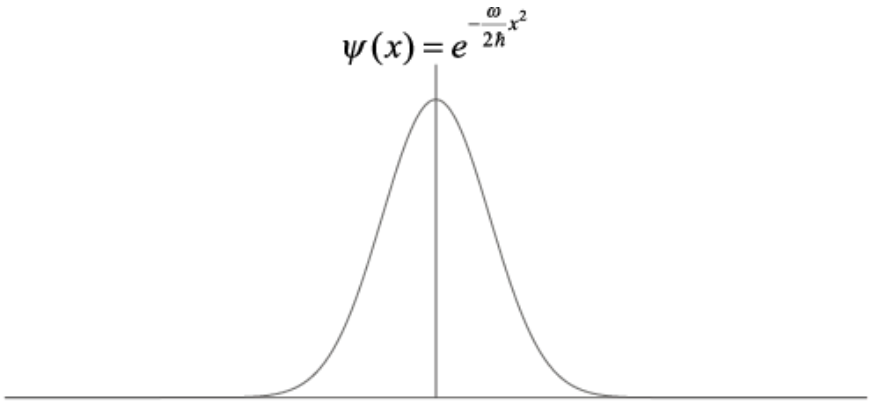
Fizyczne rozwiązania równania Schrödingera muszą być normalizowalne.

To bardzo silne ograniczenie. Tak naprawdę dla prawie wszystkich wartości *E* normalizowalne rozwiązania po prostu nie istnieją. Okazuje się jednak, że dla pewnych szczególnych wartości *E* jest inaczej, i wkrótce znajdziemy odpowiednie rozwiązania.

10.5 STAN PODSTAWOWY

Jaki jest najniższy dopuszczalny poziom energetyczny oscylatora harmonicznego? W fizyce klasycznej energia nie może być nigdy ujemna, gdyż w hamiltonianie występują tylko czynniki postaci x^2 i p^2: aby zminimalizować energię, wystarczy przyjąć, że p i x są równe zeru. W mechanice kwantowej to wymaganie okazuje się zbyt silne. Zasada nieoznaczoności mówi, że wręcz *nie można* ustalić wartości x i p jako zero. W najlepszym wypadku możemy znaleźć kompromisowy stan, w którym x i p nie będą zbyt mocno rozmyte. Ponieważ musimy pogodzić się z koniecznością przyjęcia takiego kompromisu, najniższy dopuszczalny stan energetyczny będzie *różny* od zera. Ani p^2, ani x^2 nie będą równe zeru. Ponieważ operatory $\mathbf{X}^2$ i $\mathbf{P}^2$ mają wyłącznie nieujemne wartości własne, oscylator harmoniczny nie ma żadnych ujemnych poziomów energetycznych; co więcej, nie istnieje też stan o zerowej energii.

Skoro wszystkie stany energetyczne układu muszą być dodatnie, musi też istnieć najmniejsza dopuszczalna energia i odpowiadająca jej funkcja falowa. Taki najniższy poziom energetyczny nazywa się *stanem podstawowym* i oznaczany jest przez $\psi_0(x)$. Pamiętajmy, że indeks 0 nie oznacza, iż energia jest równa zeru, tylko że przyjmuje ona najmniejszą dopuszczalną wartość.



Ilustracja 10.1. Stan podstawowy oscylatora harmonicznego

Stan podstawowy pomoże nam zidentyfikować pewne bardzo użyteczne twierdzenie matematyczne. Nie udowodnimy go tutaj, ale możemy podać bardzo proste sformułowanie:

Funkcja falowa stanu podstawowego dla dowolnego potencjału nie ma miejsc zerowych. Jest to jedyna funkcja własna energii, która nie ma węzłów.

Aby wyznaczyć stan podstawowy naszego oscylatora harmonicznego, wystarczy więc znaleźć rozwiązanie dla jakiejś wartości *E* pozbawione węzłów. Nie ma znaczenia, jak będziemy go szukać – możemy użyć do tego znanych nam sztuczek matematycznych, zgadywać albo po prostu zapytać naszego profesora. Zastosujemy tę ostatnią metodę (ja odegram rolę profesora).

Oto funkcja, która spełnia nasze wymagania:

$$\psi(x) = e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

(10.15)

Wykres tej funkcji pokazuje schematycznie ilustracja 10.1. Jak widzisz, jest ona skupiona wokół początku układu współrzędnych, tak jak należałoby tego oczekiwać od stanu o najniższej energii. Funkcja zbiega szybko do zera, gdy oddalamy się od początku układu, a więc całka z gęstości prawdopodobieństwa jest skończona. Co ważne, nie ma ona żadnych węzłów. Oznacza to, że ma szansę okazać się naszym stanem podstawowym.

Sprawdźmy, czy umiemy określić, jak hamiltonian działa na naszą funkcję. Pierwszy czynnik w hamiltonianie (lewa strona równania 10.14) każe nam przyłożyć do badanej funkcji $\psi(x)$ operator

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial x^2}$$

Wyznaczmy ten czynnik, po kolei obliczając pochodne. W pierwszym kroku dostajemy

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -\frac{\omega}{2\hbar}(2x)e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

co upraszcza się do

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -\frac{\omega}{\hbar}xe^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

Kiedy obliczamy kolejną pochodną, z uwagi na wzór na pochodną iloczynu w wyrażeniu pojawią się dwa wyrazy:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{\omega}{\hbar}xe^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2} + \frac{\omega^2}{\hbar^2}x^2e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

Wstawmy otrzymany wynik z powrotem do równania 10.14 i jednocześnie zastąpmy ψ po prawej stronie naszą kandydatką na rozwiązanie, $e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$:

$$\frac{\hbar}{2}\omega e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2} - \frac{1}{2}\omega^2x^2e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2} + \frac{1}{2}\omega^2x^2e^{-\frac{\omega^2}{2\hbar}x^2} = Ee^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

Po skróceniu czynników proporcjonalnych do $x^2e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$ odkrywamy fascynujący fakt: rozwiązywanie równania Schrödingera sprowadza się do rozwiązania równania postaci

$$\frac{\hbar}{2}\omega e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2} = Ee^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

Jak pewnie widzisz, jedyny sposób rozwiązania ostatniego równania to podstawienie za energię *E* wartości $\frac{\omega\hbar}{2}$. Inaczej mówiąc,

znaleźliśmy nie tylko funkcję falową, lecz także wartość energii stanu podstawowego. Oznaczając energię stanu podstawowego przez E_0, możemy napisać

$$E_0 = \frac{\omega\hbar}{2}$$

(10.16)

Jednocześnie okazuje się, że funkcja falowa stanu podstawowego to właśnie funkcja gaussowska, którą podsunął nam profesor:

$$\psi_0(x) = e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

Całkiem bystry gość z tego profesora.

10.6 OPERATORY ANIHILACJI I KREACJI

W trakcie naszych wykładów spotkaliśmy się z dwoma sposobami patrzenia na mechanikę kwantową. Obydwa współistnieją w fizyce od czasu Heisenberga i Schrödingera. Heisenberg lubił algebrę, macierze i obiekty, których nie umiał do końca nazwać, a które okazały się operatorami liniowymi. Schrödinger z kolei myślał w języku funkcji falowych i równań falowych, których słynnym przykładem stało się jego równanie. Oczywiście te dwa podejścia nie są ze sobą sprzeczne: funkcje tworzą przestrzeń wektorową, a pochodne to operatory.

Na razie w naszych rozważaniach dotyczących oscylatora harmonicznego skupiliśmy się na funkcjach i na równaniach różniczkowych. W wielu wypadkach jednak potężniejszym narzędziem okazuje się metoda oparta na operatorach, i podobnie jest dla oscylatora harmonicznego. Pozwala ona zredukować całe

badanie funkcji falowych i równań różniczkowych do kilku algebraicznych sztuczek, które niemal zawsze wiążą się z relacjami komutacyjnymi. Tak naprawdę radziłbym, by kiedy tylko napotkacie parę operatorów, zaraz spróbowali wyznaczyć ich komutator. Jeśli komutator to nowy operator, którego wcześniej nie widzieliście, policzcie jego komutator z początkowymi operatorami. Wtedy zaczyna się prawdziwa zabawa.

Oczywiście ostatnia porada może doprowadzić do niekończącego się ciągu nudnych rachunków. Czasami jednak może uda nam się szczęśliwie znaleźć zbiór operatorów *zamknięty ze względu na relacje komutacyjne*. W takim wypadku sytuacja staje się zaskakująco prosta: jak się wkrótce przekonasz, metody oparte na operatorach są niesamowicie skuteczne.

Zastosujmy to podejście do naszego oscylatora harmonicznego. Tak jak poprzednio, zaczniemy od wypisania hamiltonianu w postaci zależnej od operatorów **P** i **X**:

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2 + \omega^2 \mathbf{X}^2}{2}$$

(10.17)

Aby wyznaczyć pozostałe poziomy energetyczne, użyjemy kilku sztuczek. Zasadnicza idea polega na sprytnym wykorzystaniu własności **X** i **P** (w szczególności relacji komutacyjnej $[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar$) do skonstruowania dwóch nowych operatorów, zwanych operatorami *kreacji* i *anihilacji*. Kiedy operator kreacji działa na wektor własny energii (czyli na funkcję własną), powstaje nowy wektor własny, odpowiadający następnemu, wyższemu poziomowi energetycznemu. Operator anihilacji zachowuje się akurat odwrotnie: daje wektor własny energii odpowiadający poprzedniemu, niższemu poziomowi energetycznemu w porównaniu z wektorem własnym, na którym działa. Z grubsza rzecz ujmując, wielkość kreowana czy anihilowana przez te operatory to energia. Nazywa się je też operatorami *podwyższającym* i *obniżającym*. Pamiętaj jednak, że operatory

działają na wektory stanu, a nie na układy. Aby przekonać się, jak właściwie wygląda ich działanie, przepiszmy hamiltonian w postaci

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{P}^2 + \omega^2 \mathbf{X}^2)$$

(10.18)

Powyższy wzór opisuje zarówno hamiltonian klasyczny, jak i kwantowy, i równie dobrze moglibyśmy w nim użyć zapisanych małymi literami symboli *p* i *x*. Skorzystaliśmy z pogrubionych oznaczeń **P** i **X**, bo chcemy skupić się na hamiltonianie z mechaniki kwantowej.

W kolejnym kroku wykonamy pewne przekształcenia, które są w pełni poprawne dla fizyki klasycznej, ale będą wymagały uważnych modyfikacji w wypadku kwantowym. W nawiasach w powyższym wyrażeniu pojawia się suma kwadratów. Wydaje się, że gdybyśmy użyli do jej przekształcenia wzoru

$$a^2 + b^2 = (a + ib)(a - ib)$$

moglibyśmy przepisać hamiltonian w postaci

$$\mathbf{H}'' = ''\frac{1}{2}(\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X})$$

(10.19)

Powyższe wyrażenie okazuje się niemal poprawne. Dlaczego *niemal*? Ponieważ w mechanice kwantowej operatory **P** i **X** nie komutują ze sobą, a więc musimy uważać na kolejność wykonywania działań. Rozpiszmy dokładnie powyższy iloczyn i przekonajmy się, czym różni się od początkowego hamiltonianu z równania 10.18.

Uważnie pilnując kolejności wykonywanych działań, możemy rozpisać iloczyn jako

$$\frac{1}{2}(\mathbf{P}+i\omega\mathbf{X})(\mathbf{P}-i\omega\mathbf{X})=\frac{1}{2}(\mathbf{P}^2+i\omega\mathbf{XP}-i\omega\mathbf{PX}-i^2\omega^2\mathbf{X}^2)$$

$$=\frac{1}{2}(\mathbf{P}^2+i\omega(\mathbf{XP}-\mathbf{PX})-i^2\omega^2\mathbf{X}^2)$$

$$=\frac{1}{2}(\mathbf{P}^2+i\omega(\mathbf{XP}-\mathbf{PX})+\omega^2\mathbf{X}^2)$$

$$=\frac{1}{2}(\mathbf{P}^2+\omega^2\mathbf{X}^2)+\frac{1}{2}i\omega(\mathbf{XP}-\mathbf{PX})$$

Przyjrzyj się wyrażeniu leżącemu wewnątrz nawiasów po prawej stronie. Spotkaliśmy je już wcześniej – to komutator **X** z **P**. Tak naprawdę znamy jego wartość:

$$(\mathbf{XP}-\mathbf{PX})=[\mathbf{X},\mathbf{P}]=i\hbar$$

Wyrażenie odpowiadające naszemu rozpisanemu hamiltonianowi to wobec tego

$$\frac{1}{2}(\mathbf{P}^2+\omega^2\mathbf{X}^2)+\frac{1}{2}i\omega i\hbar$$

albo

$$\frac{1}{2}(\mathbf{P}^2+\omega^2\mathbf{X}^2)-\frac{1}{2}i\hbar$$

Inaczej mówiąc, rozłożone na czynniki wyrażenie, od którego zaczęliśmy w równaniu 10.19, okazuje się mniejsze od hamiltonianu o $\frac{\omega\hbar}{2}$. Aby odtworzyć faktyczny hamiltonian, musimy z powrotem dodać brakujące $\frac{\omega\hbar}{2}$:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X}) + \frac{\omega\hbar}{2}$$

Przepisywanie hamiltonianu na różne sposoby może się wydawać cokolwiek bezcelowe, ale zaufaj mi, ma to tak naprawdę sens. Przede wszystkim zauważmy, że ostatni czynnik to po prostu stała, która dodaje wartość liczbową $\frac{\omega\hbar}{2}$ do każdej wartości własnej energii. Możemy ją na razie zignorować. Później, kiedy rozwiążemy już resztę naszego problemu, możemy ją znów uwzględnić. Istota problemu kryje się w wyrażeniu (**P** + *i*ω**X**) (**P** – *i*ω**X**). Okazuje się, że występujące w nim czynniki (**P** + *i*ω**X**) i (**P** – *i*ω**X**) mają bardzo szczególne własności. Tak naprawdę są to właśnie operatory podwyższający i obniżający (czy też kreacji i anihilacji), o których pisałem wcześniej. Na razie te określenia to tylko wybrane przez nas nazwy, ale wkrótce przekonasz się, że są one jak najbardziej uzasadnione. Naturalne definicje wyglądałyby następująco:

$$\mathbf{a}^{-} = (\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X})$$

dla operatora obniżającego i

$$\mathbf{a}^{+} = (\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})$$

dla operatora podwyższającego. Historia jednak czasami staje na drodze oczywistym wyborom – w początkowych definicjach odpowiednich operatorów pojawiły się dodatkowe stałe. Oto oficjalnie przyjęte definicje:

$$\mathbf{a}^- = \frac{i}{\sqrt{2\omega\hbar}}(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X})$$

(10.20)

$$\mathbf{a}^+ = \frac{-i}{\sqrt{2\omega\hbar}}(\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})$$

(10.21)

Jeśli skorzystamy z tych definicji, hamiltonian przybierze bardzo prostą postać:

$$\mathbf{H} = \omega\hbar(\mathbf{a}^+\mathbf{a}^- + 1/2)$$

(10.22)

W dalszym ciągu będą nam potrzebne tylko dwie własności operatorów $\mathbf{a}^+$ i $\mathbf{a}^-$. Pierwsza mówi, że są one swoimi wzajemnymi sprzężeniami hermitowskimi. Wynika to bezpośrednio z ich określenia. To druga własność kryje w sobie klucz do ich skuteczności. Komutator $\mathbf{a}^+$ z $\mathbf{a}^-$ to

$$\left[\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+\right] = 1$$

Ostatnią równość łatwo udowodnić. Najpierw stosujemy bezpośrednio definicje, by napisać

$$\left[\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+\right] = \frac{1}{2\omega\hbar}\left[(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X}), (\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})\right]$$

W kolejnym kroku korzystamy z relacji komutacyjnych [**X**, **X**] = 0, [**P**, **P**] = 0 oraz $[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar$. Użycie ich w powyższym równaniu

pozwala szybko stwierdzić, że $[\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+] = 1$.

Hamiltonian z równania 10.22 można sprowadzić do jeszcze prostszej postaci, definiując nowy operator,

$$\mathbf{N} = \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^-,$$

nazywany *operatorem liczby* (albo *operatorem liczby cząstek*). I w tym wypadku na razie trzeba uznać, że to po prostu pewna nazwa, ale później okaże się ona bardzo trafna. Zapisany za pomocą operatora liczby hamiltonian przybiera postać

$$\mathbf{H} = \omega\hbar(\mathbf{N} + 1/2)$$

(10.23)

Zdefiniowaliśmy więc pewne symbole, $\mathbf{a}^+$, $\mathbf{a}^-$ i **N**, które pozwalają zapisać hamiltonian w pozornie bardzo prostej formie; nie widać jeszcze, w jaki sposób miałoby to nas przybliżyć do wyznaczenia wartości własnych energii. Przypomnijmy sobie więc moją wcześniejszą radę: kiedy tylko spotkacie dwa operatory, powinniście obliczyć ich komutator. Dla dwóch z trzech nowo zdefiniowanych operatorów odpowiedź już znamy:

$$\left[\mathbf{a}^+, \mathbf{a}^-\right] = 1$$

(10.24)

Powinniśmy więc teraz wyznaczyć komutatory operatorów podwyższającego i obniżającego z operatorem liczby **N**. Zrobimy to, nie uciekając się do szczególnych subtelności. Oto kolejne kroki:

$$[\mathbf{a}^-, \mathbf{N}] = \mathbf{a}^- \mathbf{N} - \mathbf{N}\,\mathbf{a}^- = \mathbf{a}^- \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^- - \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^- \mathbf{a}^-.$$

Wyłączywszy $\mathbf{a}^-$ za nawias, dostajemy

$$[\mathbf{a}^-, \mathbf{N}] = (\mathbf{a}^- \mathbf{a}^+ - \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^-) \mathbf{a}^-.$$

Ostatnie równanie może się wydawać skomplikowane, dopóki nie zauważymy, że wyrażenie w nawiasie to $[\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+]$, czyli po prostu 1. Ostatecznie dowiadujemy się więc, że

$$[\mathbf{a}^-, \mathbf{N}] = \mathbf{a}^-.$$

Podobną operację możemy przeprowadzić z $\mathbf{a}^+$ i **N**. Wynik wygląda niemal identycznie, różni się tylko znakiem. Oto pełna lista interesujących nas komutatorów:

$$[\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+] = 1,$$

$$[\mathbf{a}^-, \mathbf{N}] = \mathbf{a}^-,$$

$$[\mathbf{a}^+, \mathbf{N}] = -\mathbf{a}^+.$$

(10.25)

Rozważany zbiór można by nazwać algebrą komutatorów: jest to zbiór operatorów *zamknięty* ze względu na branie komutatorów. Algebry komutatorów mają cudowne własności, sprawiające, że należą one do ulubionych narzędzi fizyków teoretycznych. Przekonamy się teraz o przydatności naszej algebry komutatorów do badania słynnego przykładu oscylatora harmonicznego, wykorzystując ją do znalezienia wartości własnych i wektorów własnych **N**. Kiedy już je poznamy, będziemy mogli z łatwością odczytać odpowiednie wartości własne **H**, korzystając z równania 10.23. Potrzebna do tego sztuczka polega na zastosowaniu pewnej procedury indukcyjnej: na początku założymy, że znamy pewną

wartość własną i odpowiadający jej wektor własny **N**. Oznaczmy tę wartość własną przez *n*, a odpowiedni wektor własny przez $|n\rangle$. Ich definicja mówi nam, że

$$\mathbf{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

Rozważmy teraz nowy wektor, powstały w wyniku zadziałania na $|n\rangle$ operatorem $\mathbf{a}^+$. Udowodnimy, że on też będzie wektorem własnym **N**, związanym z inną wartością własną. W tym celu wystarczy zastosować relacje komutacyjne. Zaczniemy od przepisania wyrażenia $\mathbf{N}(\mathbf{a}^+|n\rangle)$ w nieco bardziej skomplikowanej postaci:

$$\mathbf{N}(\mathbf{a}^+|n\rangle) = [\mathbf{a}^+\mathbf{N} - (\mathbf{a}^+\mathbf{N} - \mathbf{N}\mathbf{a}^+)]|n\rangle$$

Wyrażenie w nawiasach po prawej stronie pokrywa się z $\mathbf{N}\mathbf{a}^+$, powstało z niego przez kolejne dodanie i odjęcie $\mathbf{a}^+\mathbf{N}$. Zauważ jednak, że wyrażenie w nawiasach to także jeden z komutatorów podanych w równaniach 10.25. Gdy uwzględnimy odpowiednią równość, dostaniemy

$$\mathbf{N}(\mathbf{a}^+|n\rangle) = \mathbf{a}^+(\mathbf{N}+1)|n\rangle$$

W ostatnim kroku korzystamy z faktu, że $|n\rangle$ to wektor własny **N** o wartości własnej *n*. Oznacza to, że (**N** + 1) możemy zastąpić wyrażeniem (*n* + 1):

$$\mathbf{N}(\mathbf{a}^+|n\rangle) = (n+1)(\mathbf{a}^+|n\rangle)$$

(10.26)

Jak zwykle, kiedy wykonujemy rachunki prawie na autopilocie, warto uważać, by nie przegapić czegoś ciekawego. Równanie 10.26 zawiera w sobie interesującą informację: pokazuje nam, że wektor

$\mathbf{a}^+|n\rangle$ to nowy wektor własny **N**, o wartości własnej (*n* + 1). Inaczej mówiąc, z wiedzy o istnieniu wektora własnego $|n\rangle$ wywnioskowaliśmy, że istnieje inny wektor własny, o wartości własnej zwiększonej o 1. Wszystko to można zapisać przy użyciu pojedynczego równania:

$$\mathbf{a}^+|n\rangle = |n+1\rangle$$

(10.27)

Rzecz jasna, tę samą procedurę można powtórzyć wielokrotnie, uzyskując kolejno wektory własne $|n+2\rangle$, $|n+3\rangle$ i tak dalej. Poznajemy fascynujący fakt: jeśli istnieje wartość własna *n*, to ponad nią musi istnieć nieskończony ciąg wartości własnych, różniących się między sobą o wartości całkowitoliczbowe. Nazwa *operator podwyższający* okazuje się całkiem sensowna.

Co można powiedzieć w tym kontekście o operatorze obniżającym? Jak nietrudno zgadnąć, okazuje się, że $\mathbf{a}^-|n\rangle$ to wektor własny o wartości własnej o jeden mniejszej:

$$\mathbf{a}^-|n\rangle = |n-1\rangle$$

(10.28)

Wydaje się, że wynika z tego istnienie nieskończonego ciągu wartości własnych leżących poniżej *n*, ale to nie może być prawdą. Wiemy już, że stan podstawowy ma dodatnią energię, a więc biorąc pod uwagę równość $\mathbf{H} = \omega\hbar(\mathbf{N} + 1/2)$, widzimy, że malejący ciąg wartości własnych musi się kiedyś skończyć. Jedyny sposób, w jaki to może się stać, to istnienie takiego wektora własnego $|0\rangle$, że zadziałanie na niego operatorem $\mathbf{a}^-$ daje zero (nie należy mylić $|0\rangle$ z wektorem zerowym[49]). Symbolicznie możemy to zapisać jako:

$$\mathbf{a}^-|0\rangle = 0$$

(10.29)

Ponieważ $|0\rangle$ to stan o najniższej energii, jest on stanem podstawowym, o energii $E_0 = \omega\hbar/2$. Wobec tego musi być wektorem własnym **N** o wartości własnej 0. Często mówimy, że operator $\mathbf{a}^-$ *anihiluje* stan podstawowy.

Rozumiesz już pewnie teraz, że opłacało się wprowadzić abstrakcyjne operatory $\mathbf{a}^+$, $\mathbf{a}^-$ i **N**. Ich zdefiniowanie pozwoliło nam znaleźć całe spektrum energii oscylatora harmonicznego bez konieczności rozwiązywania skomplikowanych równań. Spektrum to składa się z wartości energii

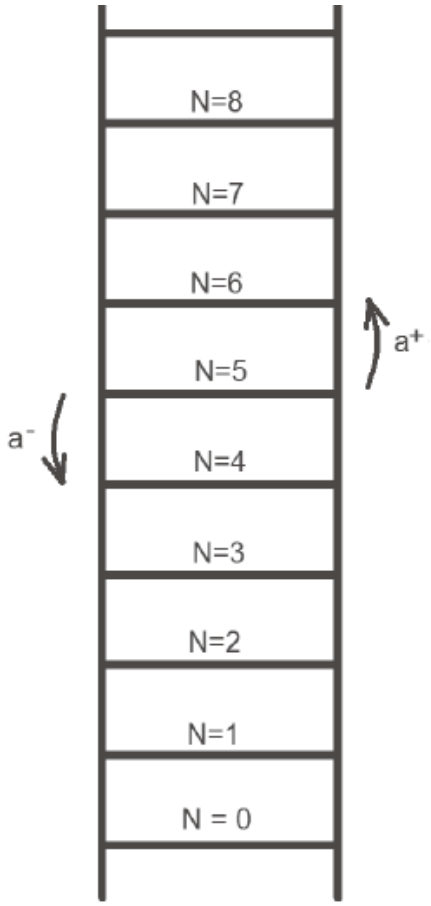
$$E_n = \omega\hbar(n+1/2)$$

$$= \omega\hbar(1/2, 3/2, 5/2 \ldots)$$

(10.30)

Ta kwantyzacja poziomów energetycznych oscylatora harmonicznego to jeden z pierwszych wyników mechaniki kwantowej, i niewątpliwie jeden z najważniejszych. Atom wodoru stanowi wspaniały przykład mechaniki kwantowej, ale w ostatecznym rozrachunku to tylko konkretny atom wodoru. Oscylator harmoniczny z kolei pojawia się wszędzie, od drgań w sieci krystalicznej, przez obwody elektryczne, do fal elektromagnetycznych. Lista ciągnie się jeszcze długo. Nawet oscylatory makroskopowe, takie jak dziecko na huśtawce, mają skwantowane poziomy energetyczne. Obecność stałej Plancka w równaniu 10.30 oznacza jednak, że przerwy między kolejnymi poziomami są w tym wypadku na tyle małe, iż nie sposób ich zaobserwować.

Nieskończone spektrum dodatnich poziomów energetycznych dla oscylatora harmonicznego nazywa się czasem wieżą, a czasem drabiną. Schematycznie przedstawiamy je na ilustracji 10.2.



Ilustracja 10.2. Drabina poziomów energetycznych oscylatora harmonicznego. Poziomy energetyczne są rozłożone w równych przedziałach. Operatory $\mathbf{a}^+$ *i* $\mathbf{a}^-$ *odpowiednio podwyższają i obniżają poziom energii.* **N** *jest ograniczony z dołu przez zero (stan podstawowy), ale jest nieograniczony z góry.*

10.7 Z POWROTEM DO FUNKCJI FALOWYCH

Rozważania w poprzednim rozdziale w pełni pokazały zaskakującą skuteczność algebr operatorów. Metoda oparta na operatorach jest faktycznie imponująca, ale jest też bardzo abstrakcyjna. Czy może nam pomóc w znalezieniu funkcji falowych, które są dużo konkretniejsze i łatwiejsze do wyobrażenia? Jak najbardziej.

Zacznijmy od stanu podstawowego. Z równania 10.29 wynika, że stan podstawowy to jedyny stan, który jest anihilowany przez $\mathbf{a}^-$. Przepiszmy teraz to równanie w języku operatorów położenia i pędu oraz funkcji falowej stanu podstawowego, $\psi_0(x)$:

$$\frac{i}{\sqrt{2\omega\hbar}}(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X})\psi_0(x) = 0$$

co po podzieleniu przez stałą daje

$$(\mathbf{P} - i\omega\mathbf{X})\psi_0(x) = 0$$

Jeśli teraz podstawimy za **P** wyrażenie $-i\hbar\frac{d}{dx}$, otrzymamy równanie różniczkowe pierwszego rzędu, które jest dużo prostsze niż równanie Schrödingera:

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{\omega x}{\hbar}\psi_0(x)$$

To naprawdę proste równanie różniczkowe, którego rozwiązanie nie powinno sprawić ci kłopotów. Możesz też po po prostu sprawdzić, że spełnia je funkcja falowa stanu podstawowego podana w równaniu 10.15. Obliczanie funkcji falowych stanów wzbudzonych (czyli różnych od stanu podstawowego) jest jeszcze łatwiejsze – nie trzeba w tym celu rozwiązywać żadnych równań. Przesuńmy się w górę drabiny, z poziomu n na $n + 1$. Możemy to zrobić, działając $\mathbf{a}^+$ na stan podstawowy. Oznaczmy funkcję falową nowego stanu przez $\psi_1(x)$.

Aby uniknąć w naszych rachunkach ciągłego przepisywania stałej $-i/\sqrt{2\omega\hbar}$, wykreślimy ją z naszej definicji $\mathbf{a}^+$. Ma to wyłącznie wpływ na stałą liczbową pojawiającą się przed funkcją falową. Otrzymujemy więc równanie

$$\psi_1(x) = (\mathbf{P} + i\omega\mathbf{X})\psi_0(x)$$

czyli

$$\psi_1(x) = (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + i\omega x)e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

Wyciągnąwszy *i* przed nawias, dostajemy

$$\psi_1(x) = i(-\hbar\frac{\partial}{\partial x} + \omega x)e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

„Najtrudniejsza" część rachunków to proste obliczenie pochodnej $e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$. Oto wynik:

$$\psi_1(x) = 2i\omega x e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

czyli

$$\psi_1(x) = 2i\omega x\psi_0(x)$$

Jedyna istotna różnica między ψ_0 a ψ_1 polega na pojawiającym się w ψ_1 czynniku *x*. Wpływa to na zachowanie funkcji falowej pierwszego stanu wzbudzonego – ma ona zero, czy też węzeł, w $x = 0$. Podobny efekt występuje przy przechodzeniu do wyższych poziomów: każdy kolejny stan wzbudzony ma dodatkowy węzeł. Zobaczmy, jak wygląda to dla $n = 2$. W tym celu wystarczy znów zastosować $\mathbf{a}^+$:

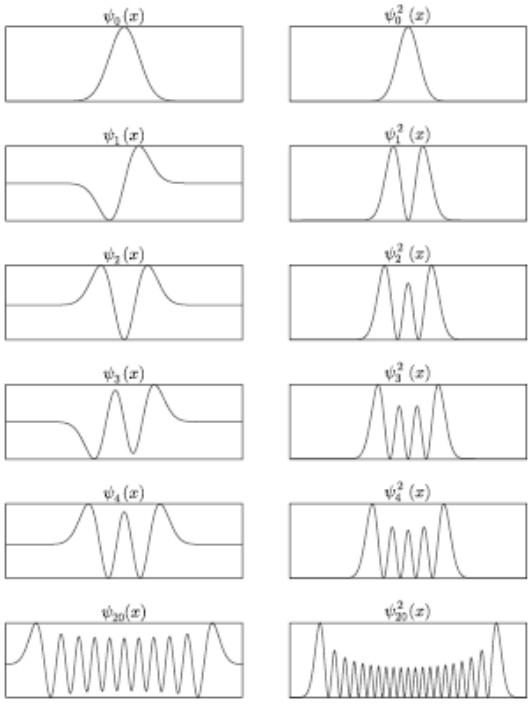
$$\psi_2(x) = i(-\hbar\frac{\partial}{\partial x} + \omega x)(xe^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2})$$

Nietrudno zauważyć, że czynnik ωx spowoduje powstanie wyrazu ωx^2. Czynnik $-\frac{\partial}{\partial x}$ z kolei skutkuje powstaniem dwóch wyrazów, z uwagi na wzór na iloczyn pochodnych. Jeden z nich bierze się z funkcji wykładniczej (i zawiera kolejne ωx), drugi z policzenia pochodnej x. Jeśli wykonasz odpowiednie rachunki, otrzymasz funkcję falową postaci

$$\psi_2(x) = (-\hbar + 2\omega x^2)e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$$

Odpowiednią procedurę można kontynuować, przesuwając się w górę drabiny. Szybko dostrzeżesz wtedy kolejną regułę: każda funkcja własna to wielomian zmiennej x pomnożony przez $e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$. Ponieważ funkcja wykładnicza dąży do zera szybciej, niż rośnie którykolwiek z tych wielomianów, każda z funkcji własnych zbliża się do zera, gdy x zbiega do plus czy minus nieskończoności. Co więcej, ponieważ stopień każdego kolejnego wielomianu jest o jeden większy od stopnia poprzedniego, każda z funkcji własnych ma o jedno zero więcej[50]. To wyjaśnia też, dlaczego kolejne funkcje własne są na przemian symetryczne i antysymetryczne. Ściśle mówiąc, funkcje własne zawierające wielomiany parzystego stopnia są symetryczne, a te z wielomianami nieparzystego stopnia – antysymetryczne. Występujące w tym ciągu wielomiany są dobrze znane, nazywa się je *wielomianami Hermite'a*. Funkcja własna stanu podstawowego $e^{-\frac{\omega}{2\hbar}x^2}$, pojawiająca się we wszystkich funkcjach własnych dla wyższych energii, jest symetryczna.

Ilustracja 10.3 przedstawia funkcje własne kilku różnych poziomów energetycznych. Każda kolejna funkcja własna oscyluje szybciej od poprzedniej. Odpowiada to wzrostowi pędu: im szybciej oscyluje funkcja falowa, tym większy jest pęd układu. Funkcje falowe wyższych poziomów energetycznych są też bardziej rozmyte. Z fizycznego punktu widzenia oznacza to, że masa oddala się od punktu równowagi i porusza coraz szybciej.



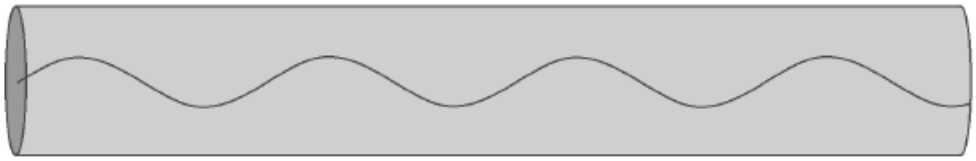
Ilustracja 10.3. Funkcje własne oscylatora harmonicznego. Po lewej stronie są pokazane amplitudy, po prawej prawdopodobieństwa. Funkcje falowe związane z większymi energiami oscylują szybciej i są bardziej rozmyte.

Znajomość funkcji własnych oscylatora harmonicznego pokazuje nam jeszcze jeden istotny fakt. Chociaż w granicach zbliżają się one do zera (dość szybko), nigdy go nie osiągają. Oznacza to, że istnieje niewielka, ale niezerowa szansa znalezienia cząstki „poza studnią" definiowaną przez odpowiednią funkcję energii potencjalnej. To zjawisko, zwane *kwantowym tunelowaniem*, nie występuje w fizyce klasycznej.

10.8 FUNDAMENTALNA ROLA KWANTYZACJI

Podczas tych wykładów wspięliśmy się już bardzo wysoko, ale to jeszcze nie szczyt. Z punktu obserwacyjnego, w którym się znaleźliśmy, możemy dostrzec pierwsze elementy olbrzymiego pejzażu kwantowej teorii pola. To materiał na kolejną książkę. A może raczej trzy książki. Tak czy inaczej odrobinę perspektywy widać już teraz.

Rozważmy przykład promieniowania elektromagnetycznego we wnęce, przedstawiony na ilustracji 10.4. W tym kontekście słowo wnęka oznacza obszar przestrzeni ograniczony dwoma idealnie odbijającymi fale lustrami, które powodują, że promieniowanie wędruje bez końca tam i z powrotem. Powinniście myśleć o wnęce jako o długiej metalowej rurze, wewnątrz której promieniowanie może swobodnie podróżować w obu kierunkach.



Ilustracja 10.4. Promieniowanie elektromagnetyczne we wnęce

Do wnęki daje się dopasować wiele różnych długości fali. Rozważmy fale o długości λ. Tak jak wszystkie fale, będą one oscylować, podobnie jak zawieszona na końcu sprężyny masa. Ważne jest jednak, by umieć odróżnić te sytuacje: oscylatory to niekoniecznie masy zawieszone na sprężynach. To, co oscyluje we wnęce, to pola elektryczne i magnetyczne. Każdej długości fali odpowiada matematyczny oscylator harmoniczny opisujący amplitudę, czyli natężenie pola. Tak naprawdę mamy do czynienia z wieloma oscylatorami harmonicznymi jednocześnie. Na szczęście każdy oscyluje w sposób niezależny od innych, a więc możemy się skoncentrować na falach o pewnej szczególnej długości i zignorować wszystkie inne.

Z oscylatorem harmonicznym można powiązać tylko jedną istotną liczbę – jego częstotliwość. Zapewne wiesz już, jak obliczyć

częstotliwość fali o długości λ:

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$$

W fizyce klasycznej częstotliwość to oczywiście tylko częstotliwość, i nie niesie ze sobą dodatkowego znaczenia. W mechanice kwantowej określa ona jednak pojedynczy kwant energii oscylatora. Inaczej mówiąc, energia zawarta w falach o długości λ musi przybierać wartości

$$(n+1/2)\hbar\omega$$

Z naszego punktu widzenia czynnik $(1/2)\hbar\omega$ nie jest szczególnie istotny. Nazywa się go energią punktu zerowego i można go, przynajmniej na razie, pominąć. Jeśli tak zrobimy, wartości energii fal o długości λ przybierają postać

$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda} n$$

gdzie n może być dowolną nieujemną liczbą całkowitą. Inaczej mówiąc, energia fali elektromagnetycznej zostaje skwantowana: wyraża się w niepodzielnych jednostkach

$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda}$$

Dla kogoś zajmującego się fizyką klasyczną wygląda to bardzo dziwnie. Niezależnie od tego, co zrobimy z badanym układem, jego energia zawsze wyraża się w jednostkach, których nie sposób podzielić na mniejsze.

Być może już wiesz, że jednostki te nazywa się fotonami. Tak naprawdę *foton* to tylko inne określenie skwantowanej jednostki

energii w kwantowym oscylatorze harmonicznym. Te same fakty daje się jednak też opisać inaczej. Ponieważ fotony są niepodzielne, można o nich myśleć jako o cząstkach elementarnych. Falę wzbudzoną do *n*-tego stanu kwantowego będziemy wtedy traktować jako zbiór *n* fotonów.

Ile wynosi energia pojedynczego fotonu? Odpowiedź jest oczywista, to po prostu energia odpowiadająca dodaniu kolejnej jednostki, czyli

$$E(\lambda) = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}$$

Widzimy tu związek, który wywierał dominujący wpływ na fizykę przez ponad sto lat: im mniejsza jest długość fali fotonu, tym większa jest jego energia. Skoro fotony o niewielkich długościach fali są tak kosztowne energetycznie, dlaczego fizyków miałoby interesować ich wytwarzanie? Po to, by lepiej widzieć. Tak jak omówiliśmy to w pierwszym wykładzie, aby wyraźnie zobaczyć obiekt o danym rozmiarze, trzeba użyć fal o podobnych lub mniejszych rozmiarach. Aby zobaczyć ludzką sylwetkę, wystarczą długości fali rzędu dziesięciu centymetrów. Do uzyskania obrazu malutkiej drobiny kurzu może być potrzebne światło widzialne o dużo mniejszej długości fali. W celu obserwacji składników protonu długość fali musi być mniejsza niż 10^{-15} m, a więc odpowiednie fotony powinny mieć bardzo dużą energię. Wszystko to ostatecznie bierze się z własności oscylatora harmonicznego.

Powyższą obserwacją kończymy ten tom serii „Teoretyczne minimum". Już teraz czekam na następne spotkanie z tobą przy okazji omawiania szczególnej teorii względności.

47 Tę koncepcję wyjaśniliśmy w pierwszym tomie.

48 Nie musimy tu używać znaku sumowania, bo mamy do czynienia z jednym stopniem swobody.

49 Wektor zerowy to wektor o wszystkich składowych równych zeru. Z kolei wektor $|0\rangle$ to wektor stanu, o niezerowych składowych.

50 Okazuje się, że wszystkie miejsca zerowe odpowiadają rzeczywistym wartościom *x*, ale nie wynika to w prosty sposób z naszych dotychczasowych obserwacji. Z punktu widzenia fizyki zera naszych funkcji mogą się wydawać dość dziwaczne, ponieważ są to punkty, w których nigdy nie znajdziemy poruszającej się masy, chociaż rześko przesuwa się ona tam i z powrotem po całej osi.

DODATEK

MACIERZE PAULIEGO

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

DZIAŁANIE OPERATORÓW SPINU

$$|g\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \sigma_z |g\rangle = |g\rangle$$

$$\sigma_x |g\rangle = |d\rangle$$
$$\sigma_y |g\rangle = i|d\rangle$$

$$|d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \sigma_z |d\rangle = -|d\rangle$$

$$\sigma_x |d\rangle = |g\rangle$$
$$\sigma_y |d\rangle = -i|g\rangle$$

$$|p\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \sigma_z |p\rangle = |l\rangle$$

$$\sigma_x |p\rangle = |p\rangle$$
$$\sigma_y |p\rangle = -i|l\rangle$$

$$|l\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \sigma_z |l\rangle = |p\rangle$$

$$\sigma_x |l\rangle = |-l\rangle$$
$$\sigma_y |l\rangle = i|p\rangle$$

$$|w\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \sigma_z |w\rangle = |z\rangle$$

$$\sigma_x |w\rangle = i|z\rangle$$
$$\sigma_y |w\rangle = |w\rangle$$

$$|z\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \sigma_z |z\rangle = |w\rangle$$

$$\sigma_x |z\rangle = -i|w\rangle$$
$$\sigma_y |z\rangle = -|z\rangle$$

ZMIANA BAZY

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

$$|w\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

$$|z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|d\rangle$$

SKŁADOWA SPINU W KIERUNKU $\hat{n}$

Notacja wektorowa

$$\sigma_n = \vec{\sigma} \cdot \hat{n}$$

Rozpisanie na składowe

$$\sigma_n = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z$$

Konkretniejsza postać

$$\sigma_n = n_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + n_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + n_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Jako pojedyncza macierz

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} n_z & \left(n_x - i n_y\right) \\ \left(n_x + i n_y\right) & -n_z \end{pmatrix}$$

TABELKI MNOŻENIA OPERATORÓW SPINU

Kilka słów o oznaczeniach: w tabelce 3 poniżej symbolu *z* używamy na dwa różne sposoby. Wewnątrz ketu, na przykład w $|wz\rangle$, stanowi on część oznaczenia stanu – *wz* oznacza „do wewnątrz–na zewnątrz”. Kiedy jednak *z* pojawia się w oznaczeniu operatora, na przykład w σ_z, oznacza kierunek w przestrzeni – oś *z*.

Tabelka 1: Baza góra–dół

	Wektory własne 2-spinu			
	$\|$**gg**	$\|$**gd**	$\|$**dg**	$\|$**dd**
σ_z	$\|gg$	$\|gd$	$-\|dg$	$-\|dd$
σ_x	$\|dg$	$\|dd$	$\|gg$	$\|gd$
σ_y	$i\|dg$	$i\|dd$	$-i\|gg$	$-i\|gd$
τ_z	$\|gg$	$-\|gd$	$\|dg$	$-\|dd$
τ_x	$\|gd$	$\|gg$	$\|dd$	$\|dg$
τ_y	$i\|gd$	$-i\|gg$	$i\|dd$	$-i\|dg$

Tabelka 2: Baza lewa–prawa

	Wektory własne 2-spinu			
	$\|\mathbf{pp}$	$\|\mathbf{pl}$	$\|\mathbf{lp}$	$\|\mathbf{ll}$
σ_z	$\|lp$	$\|ll$	$\|pp$	$\|pl$
σ_x	$\|pp$	$\|pl$	$-\|lp$	$-\|ll$
σ_y	$-i\|lp$	$-i\|ll$	$i\|pp$	$i\|pl$
τ_z	$\|pl$	$\|pp$	$\|ll$	$\|lp$
τ_x	$\|pp$	$-\|pl$	$\|lp$	$-\|ll$
τ_y	$-i\|pl$	$i\|pp$	$-i\|ll$	$i\|lp$

Tabelka 3: Baza wewnątrz–zewnątrz

	Wektory własne 2-spinu			
	$\|\mathbf{ww}$	$\|\mathbf{wz}$	$\|\mathbf{zw}$	$\|\mathbf{zz}$
σ_z	$\|zw$	$\|zz$	$\|ww$	$\|zw$
σ_x	$i\|zw$	$i\|zz$	$-\|ww$	$-\|wz$
σ_y	$\|ww$	$\|wz$	$-\|zw$	$-\|zz$
τ_z	$\|wz$	$\|ww$	$\|zz$	$\|zw$
τ_x	$i\|wz$	$-i\|ww$	$i\|zz$	$-i\|zw$
τ_y	$\|ww$	$-\|wz$	$\|zw$	$-\|zz$

Spis treści

PRZEDMOWA
PROLOG
- PROFESOR I SKRZYPEK WCHODZĄ DO BARU
- CO ZE SOBĄ ZABRAĆ?

WSTĘP
WYKŁAD 1. Układy i doświadczenia
- 1.1 MECHANIKA KWANTOWA JEST INNA
- 1.2 SPINY I KUBITY
- 1.3 EKSPERYMENT
- 1.4 EKSPERYMENTY NIGDY NIE SĄ DELIKATNE
- 1.5 ZDANIA LOGICZNE
- 1.6 TESTOWANIE ZDAŃ KLASYCZNYCH
- 1.7 TESTOWANIE ZDAŃ KWANTOWYCH
- 1.8 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – LICZBY ZESPOLONE
- 1.9 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – PRZESTRZENIE WEKTOROWE

WYKŁAD 2. Stany kwantowe
- 2.1 STANY I WEKTORY
- 2.2 PRZEDSTAWIANIE STANÓW SPINU
- 2.3 WZDŁUŻ OSI X
- 2.4 WZDŁUŻ OSI Y
- 2.5 LICZENIE PARAMETRÓW
- 2.6 REPREZENTACJA STANÓW SPINOWYCH ZA POMOCĄ WEKTORÓW KOLUMNOWYCH
- 2.7 PODSUMOWANIE

WYKŁAD 3. Zasady mechaniki kwantowej
- 3.1 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – OPERATORY LINIOWE
- 3.2 ZASADY MECHANIKI KWANTOWEJ
- 3.3 PRZYKŁAD: OPERATORY SPINU
- 3.4 KONSTRUKCJA OPERATORÓW SPINU
- 3.5 CZĘSTO SPOTYKANA POMYŁKA
- 3.6 JESZCZE RAZ O OPERATORACH 3-WEKTOROWYCH

3.7 ZBIERANIE NAUKOWYCH OWOCÓW
3.3 REGUŁA POLARYZACJI SPINU
WYKŁAD 4. Czas i zmiana
4.1 PRZYPOMNIENIE WERSJI KLASYCZNEJ
4.2 UNITARNOŚĆ
4.3 DETERMINIZM W MECHANICE KWANTOWEJ
4.4 PRZYJRZYJMY SIĘ BLIŻEJ U(T)
4.5 HAMILTONIAN
4.6 CO SIĘ STAŁO Z ?
4.7 WARTOŚCI OCZEKIWANE
4.8 POMINIĘCIE CZYNNIKA FAZOWEGO
4.9 ZWIĄZKI Z MECHANIKĄ KLASYCZNĄ
4.10 ZASADA ZACHOWANIA ENERGII
4.11 SPIN W POLU MAGNETYCZNYM
4.12 ROZWIĄZYWANIE RÓWNANIA SCHRÖDINGERA
4.13 PRZEPIS NA KET(A) SCHRÖDINGERA
4.14 KOLAPS
WYKŁAD 5. Nieoznaczoność i zależność od czasu
5.1 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – ZBIORY ZUPEŁNE KOMUTUJĄCYCH OBSERWABLI
5.2 POMIAR
5.3 ZASADA NIEOZNACZONOŚCI
5.4 SENS NIEOZNACZONOŚCI
5.5 NIERÓWNOŚĆ CAUCHY'EGO–SCHWARZA
5.6 NIERÓWNOŚĆ TRÓJKĄTA I NIERÓWNOŚĆ CAUCHY'EGO–SCHWARZA
5.7 OGÓLNA ZASADA NIEOZNACZONOŚCI
WYKŁAD 6. Łączenie układów ze sobą: splątanie
6.1 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – ILOCZYNY TENSOROWE
6.2 KLASYCZNE KORELACJE
6.3 ŁĄCZENIE UKŁADÓW KWANTOWYCH ZE SOBĄ
6.4 DWA SPINY
6.5 STANY PRODUKTOWE
6.6 ZLICZANIE PARAMETRÓW DLA STANÓW PRODUKTOWYCH
6.7 STANY SPLĄTANE
6.8 OBSERWABLE ALICE I BOBA

6.9 OBSERWABLE ZŁOŻONE
WYKŁAD 7. Bardziej szczegółowo o splątaniu
7.1 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – ILOCZYNY TENSOROWE W POSTACI ZALEŻNEJ OD KONKRETNYCH WSPÓŁRZĘDNYCH
7.2 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – ILOCZYNY ZEWNĘTRZNE
7.3 MACIERZE GĘSTOŚCI: NOWE NARZĘDZIE
7.4 SPLĄTANIE I MACIERZE GĘSTOŚCI
7.5 SPLĄTANIE DLA DWÓCH SPINÓW
7.6 KONKRETNY PRZYKŁAD: OBLICZANIE MACIERZY GĘSTOŚCI ALICE
7.7 TESTY NA SPLĄTANIE
7.8 PROCES POMIARU
7.9 SPLĄTANIE I LOKALNOŚĆ
7.10 KWANTOWY SYMULATOR: WPROWADZENIE DO TWIERDZENIA BELLA
7.11 PODSUMOWANIE WIADOMOŚCI O SPLĄTANIU
WYKŁAD 8. Cząstki i fale
8.1 INTERLUDIUM MATEMATYCZNE – WŁASNOŚCI FUNKCJI CIĄGŁYCH
8.2 STAN CZĄSTKI
8.3 TRANSFORMATA FOURIERA I BAZA PĘDU
8.4 KOMUTATORY I NAWIASY POISSONA
8.5 ZASADA NIEOZNACZONOŚCI HEISENBERGA
WYKŁAD 9. Dynamika cząstek
9.1 PROSTY PRZYKŁAD
9.2 NIERELATYWISTYCZNE CZĄSTKI SWOBODNE
9.3 RÓWNANIE SCHRÖDINGERA NIEZALEŻNE OD CZASU
9.4 PRĘDKOŚĆ I PĘD
9.5 KWANTYZACJA
9.6 SIŁY
9.7 RUCH PO PROSTEJ I GRANICA KLASYCZNA
9.8 CAŁKI PO TRAJEKTORIACH
WYKŁAD 10. Oscylator harmoniczny
10.1 OPIS KLASYCZNY
10.2 OPIS KWANTOWOMECHANICZNY
10.3 RÓWNANIE SCHRÖDINGERA

10.4 POZIOMY ENERGETYCZNE
10.5 STAN PODSTAWOWY
10.6 OPERATORY ANIHILACJI I KREACJI
10.7 Z POWROTEM DO FUNKCJI FALOWYCH
10.8 FUNDAMENTALNA ROLA KWANTYZACJI
DODATEK
MACIERZE PAULIEGO
DZIAŁANIE OPERATORÓW SPINU
ZMIANA BAZY
SKŁADOWA SPINU W KIERUNKU
TABELKI MNOŻENIA OPERATORÓW SPINU